

Capítulo 42 Moléculas e Matéria Condensada

RODRIGO ALVES DIAS

Universidade Federal de Juiz de Fora - UFJF

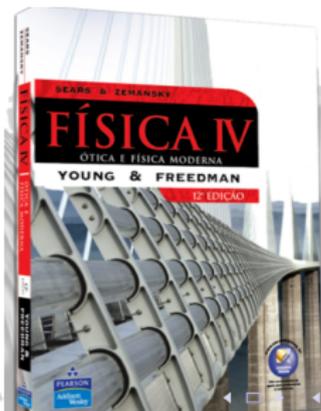
Livro texto: Física 3 - Eletromagnetismo

Autores: Sears e Zemansky

Edição: 12^a

Editora: Pearson - Addison and Wesley

15 de julho de 2014



Objetivos de Aprendizagem

Ao estudar este capítulo você aprenderá:

- ▶ Os diversos tipos de ligações que mantêm os átomos unidos.

Objetivos de Aprendizagem

Ao estudar este capítulo você aprenderá:

- ▶ Os diversos tipos de ligações que mantêm os átomos unidos.
- ▶ Como as dinâmicas de rotação e vibração das moléculas são reveladas pelos espectros moleculares.

Objetivos de Aprendizagem

Ao estudar este capítulo você aprenderá:

- ▶ Os diversos tipos de ligações que mantêm os átomos unidos.
- ▶ Como as dinâmicas de rotação e vibração das moléculas são reveladas pelos espectros moleculares.
- ▶ Como e por que os átomos formam estruturas cristalinas.

Objetivos de Aprendizagem

Ao estudar este capítulo você aprenderá:

- ▶ Os diversos tipos de ligações que mantêm os átomos unidos.
- ▶ Como as dinâmicas de rotação e vibração das moléculas são reveladas pelos espectros moleculares.
- ▶ Como e por que os átomos formam estruturas cristalinas.
- ▶ Usar o conceito de banda de energia para explicar as propriedades elétricas dos sólidos.

Objetivos de Aprendizagem

Ao estudar este capítulo você aprenderá:

- ▶ Os diversos tipos de ligações que mantêm os átomos unidos.
- ▶ Como as dinâmicas de rotação e vibração das moléculas são reveladas pelos espectros moleculares.
- ▶ Como e por que os átomos formam estruturas cristalinas.
- ▶ Usar o conceito de banda de energia para explicar as propriedades elétricas dos sólidos.
- ▶ Um modelo simples para metais que explica muitas de suas propriedades físicas.

Objetivos de Aprendizagem

Ao estudar este capítulo você aprenderá:

- ▶ Os diversos tipos de ligações que mantêm os átomos unidos.
- ▶ Como as dinâmicas de rotação e vibração das moléculas são reveladas pelos espectros moleculares.
- ▶ Como e por que os átomos formam estruturas cristalinas.
- ▶ Usar o conceito de banda de energia para explicar as propriedades elétricas dos sólidos.
- ▶ Um modelo simples para metais que explica muitas de suas propriedades físicas.
- ▶ Como o caráter de um semicondutor pode ser radicalmente transformado pela adição de pequenas quantidades de uma impureza.

Objetivos de Aprendizagem

Ao estudar este capítulo você aprenderá:

- ▶ Os diversos tipos de ligações que mantêm os átomos unidos.
- ▶ Como as dinâmicas de rotação e vibração das moléculas são reveladas pelos espectros moleculares.
- ▶ Como e por que os átomos formam estruturas cristalinas.
- ▶ Usar o conceito de banda de energia para explicar as propriedades elétricas dos sólidos.
- ▶ Um modelo simples para metais que explica muitas de suas propriedades físicas.
- ▶ Como o caráter de um semicondutor pode ser radicalmente transformado pela adição de pequenas quantidades de uma impureza.
- ▶ Algumas aplicações tecnológicas de dispositivos semicondutores.

Objetivos de Aprendizagem

Ao estudar este capítulo você aprenderá:

- ▶ Os diversos tipos de ligações que mantêm os átomos unidos.
- ▶ Como as dinâmicas de rotação e vibração das moléculas são reveladas pelos espectros moleculares.
- ▶ Como e por que os átomos formam estruturas cristalinas.
- ▶ Usar o conceito de banda de energia para explicar as propriedades elétricas dos sólidos.
- ▶ Um modelo simples para metais que explica muitas de suas propriedades físicas.
- ▶ Como o caráter de um semicondutor pode ser radicalmente transformado pela adição de pequenas quantidades de uma impureza.
- ▶ Algumas aplicações tecnológicas de dispositivos semicondutores.
- ▶ Por que certos materiais se tornam supercondutores a baixas temperaturas.

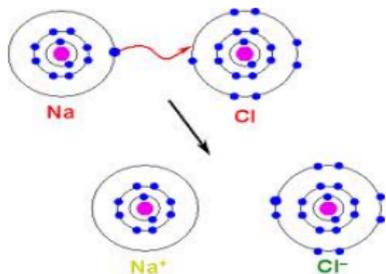
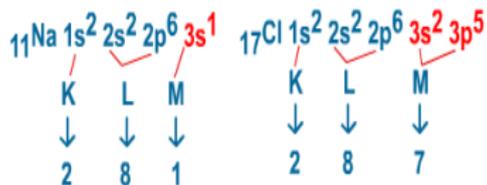
Ligação iônica

- ▶ A ligação iônica é uma interação entre átomos ionizáveis que possuem cargas com sinais contrários.

Ligação iônica

- ▶ A ligação iônica é uma interação entre átomos ionizáveis que possuem cargas com sinais contrários.
- ▶ Ex: Cloreto de sódio (NaCl).

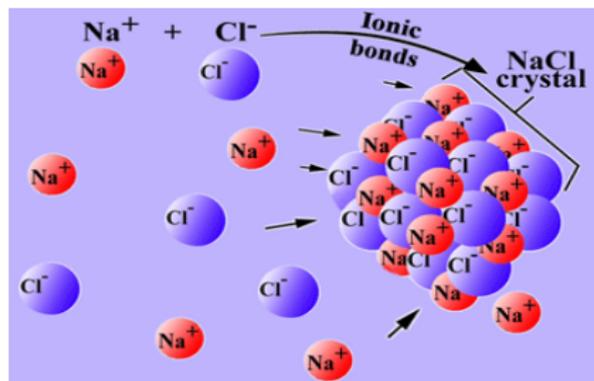
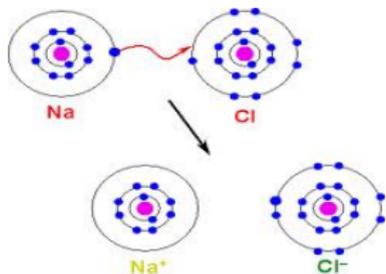
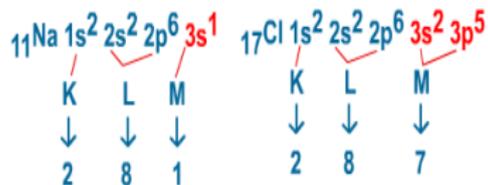
Considerando átomos neutros dos elementos sódio e cloro, temos as seguintes distribuições eletrônicas.



Ligação iônica

- ▶ A ligação iônica é uma interação entre átomos ionizáveis que possuem cargas com sinais contrários.
- ▶ Ex: Cloreto de sódio (NaCl).

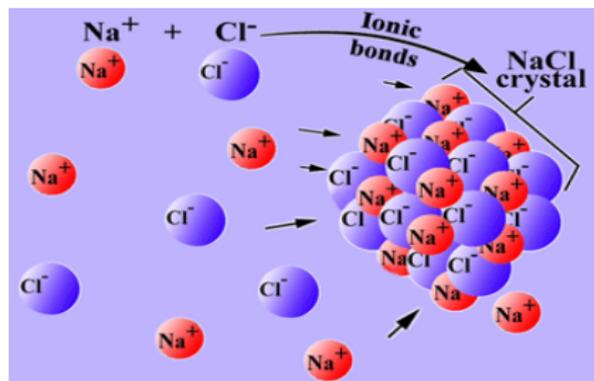
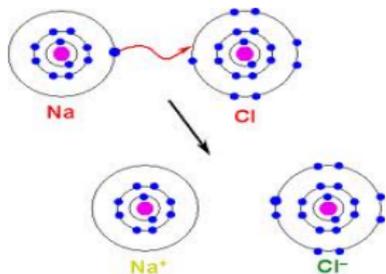
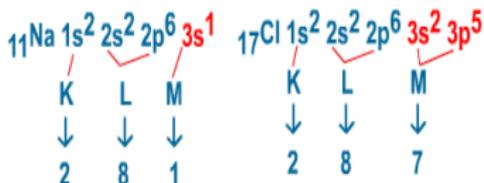
Considerando átomos neutros dos elementos sódio e cloro, temos as seguintes distribuições eletrônicas.



Ligação iônica

- ▶ A ligação iônica é uma interação entre átomos ionizados que possuem cargas com sinais contrários.
- ▶ Ex: Cloreto de sódio (NaCl).

Considerando átomos neutros dos elementos sódio e cloro, temos as seguintes distribuições eletrônicas.

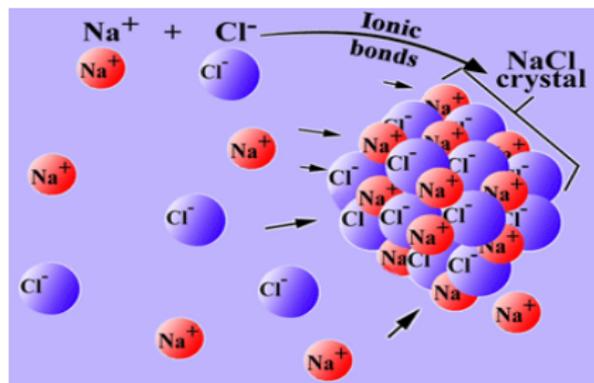
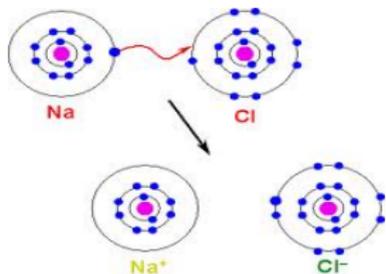
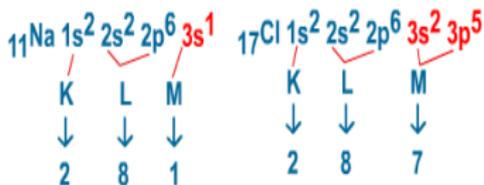


- ▶ Distribuições de cargas quase esfericamente simétricas. Não dependem das direções. Podem envolver mais que um elétron/átomo.

Ligação iônica

- ▶ A ligação iônica é uma interação entre átomos ionizáveis que possuem cargas com sinais contrários.
- ▶ Ex: Cloreto de sódio (NaCl).

Considerando átomos neutros dos elementos sódio e cloro, temos as seguintes distribuições eletrônicas.

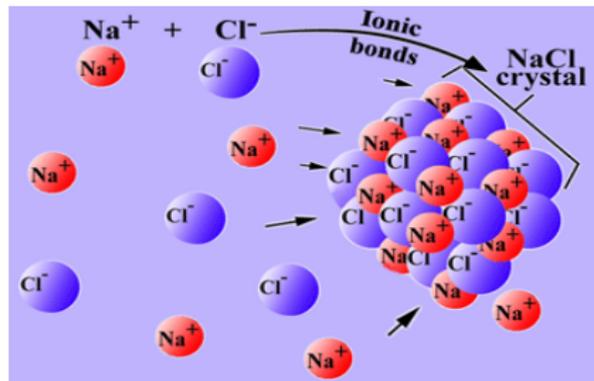
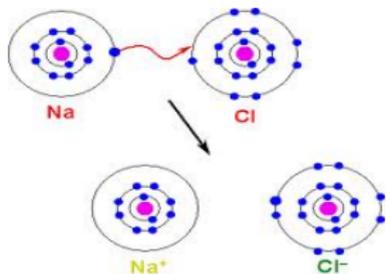
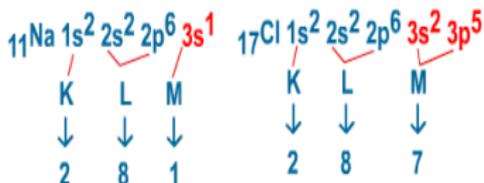


- ▶ Distribuições de cargas quase esfericamente simétricas. Não dependem das direções. Podem envolver mais que um elétron/átomo.
- ▶ *Energia de ionização ou potencial de ionização do sódio, $E_{ion} = -5,138\text{eV}$.*

Ligação iônica

- ▶ A ligação iônica é uma interação entre átomos ionizáveis que possuem cargas com sinais contrários.
- ▶ Ex: Cloreto de sódio (NaCl).

Considerando átomos neutros dos elementos sódio e cloro, temos as seguintes distribuições eletrônicas.

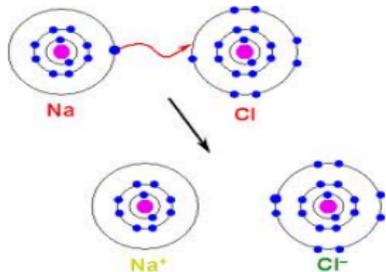
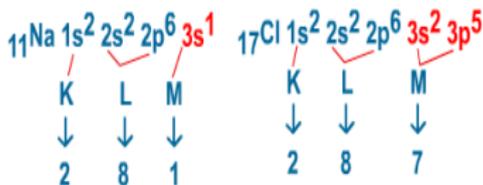


- ▶ Distribuições de cargas quase esfericamente simétricas. Não dependem das direções. Podem envolver mais que um elétron/átomo.
- ▶ Energia de ionização ou potencial de ionização do sódio, $E_{ion} = -5,138\text{eV}$.
- ▶ Energia de afinidade eletrônica do cloro, $E_{afin} = 3,613\text{eV}$.

Ligação iônica

- ▶ A ligação iônica é uma interação entre átomos ionizáveis que possuem cargas com sinais contrários.
- ▶ Ex: Cloreto de sódio (NaCl).

Considerando átomos neutros dos elementos sódio e cloro, temos as seguintes distribuições eletrônicas.

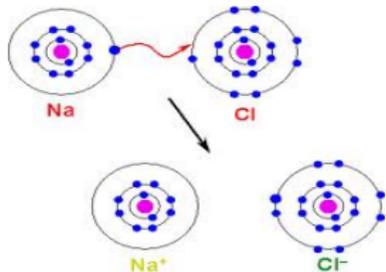
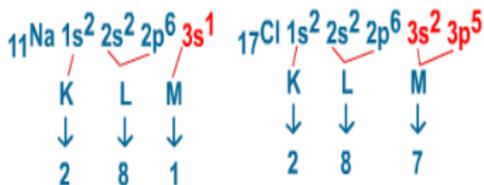


- ▶ Distribuições de cargas quase esfericamente simétricas. Não dependem das direções. Podem envolver mais que um elétron/átomo.
- ▶ *Energia de ionização ou potencial de ionização do sódio*, $E_{ion} = -5,138\text{eV}$.
- ▶ *Energia de afinidade eletrônica do cloro*, $E_{afin} = 3,613\text{eV}$.
- ▶ A criação de íons afastados, Na^+ e Cl^- , exige um investimento de energia de $5,138\text{eV} - 3,613\text{eV} = 1,525\text{eV}$.

Ligação iônica

- ▶ A ligação iônica é uma interação entre átomos ionizáveis que possuem cargas com sinais contrários.
- ▶ Ex: Cloreto de sódio (NaCl).

Considerando átomos neutros dos elementos sódio e cloro, temos as seguintes distribuições eletrônicas.

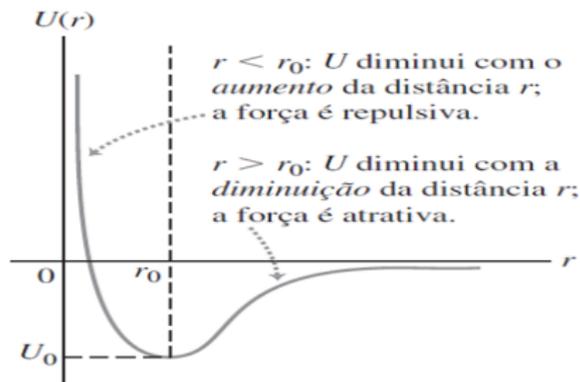
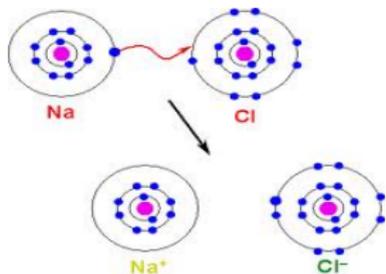
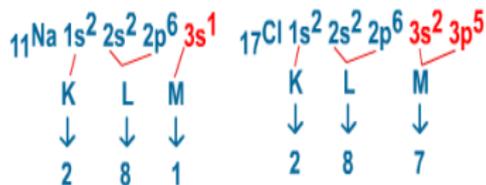


- ▶ Distribuições de cargas quase esfericamente simétricas. Não dependem das direções. Podem envolver mais que um elétron/átomo.
- ▶ *Energia de ionização ou potencial de ionização do sódio*, $E_{ion} = -5,138\text{eV}$.
- ▶ *Energia de afinidade eletrônica do cloro*, $E_{afin} = 3,613\text{eV}$.
- ▶ A criação de íons afastados, Na^+ e Cl^- , exige um investimento de energia de $5,138\text{eV} - 3,613\text{eV} = 1,525\text{eV}$.
- ▶ A energia de ligação da molécula do $\text{NaCl} = 5,7\text{eV} - 1,525\text{eV} = 4,2\text{eV}$ para distância de $0,24\text{nm}$.

Ligação iônica

- ▶ A ligação iônica é uma interação entre átomos ionizáveis que possuem cargas com sinais contrários.
- ▶ Ex: Cloreto de sódio (NaCl).

Considerando átomos neutros dos elementos sódio e cloro, temos as seguintes distribuições eletrônicas.



$$V(r) = \frac{A}{r^b} - \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

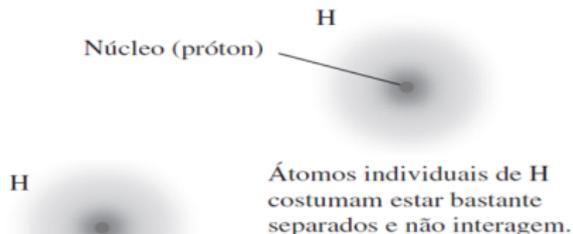
Ligação Covalente

- ▶ A ligação covalente é caracterizada por uma participação mais imparcial dos elétrons pelos dois átomos.

Ligação Covalente

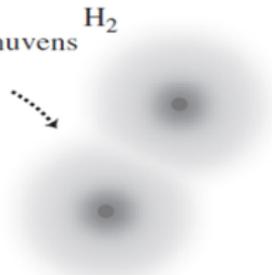
- ▶ A ligação covalente é caracterizada por uma participação mais imparcial dos elétrons pelos dois átomos.
- ▶ Ex: Molécula de Hidrogênio (H_2).
- ▶ Também é chamada de *homopolar*, **ligação de elétron compartilhado** ou **ligação com um par de elétrons**.
- ▶ A energia da ligação covalente em uma molécula de hidrogênio H_2 é $-4,48eV$.
- ▶ Spins opostos constituem a condição fundamental para a existência de uma ligação covalente, não mais do que 2 elétrons participam da ligação.

Os dois átomos de hidrogênio estão bem separados.



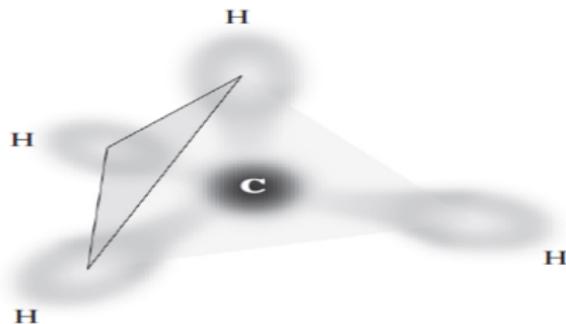
Molécula de H_2

Ligação covalente: as nuvens eletrônicas dos dois elétrons com spins contrários estão concentradas na região entre os núcleos.



Ligação Covalente

- ▶ A ligação covalente é caracterizada por uma participação mais imparcial dos elétrons pelos dois átomos.
- ▶ Ex: Molécula de Hidrogênio (H_2).
- ▶ Também é chamada de *homopolar*, **ligação de elétron compartilhado** ou **ligação com um par de elétrons**.
- ▶ A energia da ligação covalente em uma molécula de hidrogênio H_2 é $-4,48eV$.
- ▶ Spins opostos constituem a condição fundamental para a existência de uma ligação covalente, não mais do que 2 elétrons participam da ligação.



- ▶ Ligações iônicas/covalentes: 2 categorias extremas de ligações moleculares. Normalmente ocorre transferência parcial de um ou mais elétrons.
- ▶ **Momento de dipolo elétrico:** Presença de cargas negativas em uma das suas extremidades e de cargas positivas na outra. **Moléculas polares.**

Ligação de Van der Waals

- ▶ As ligações iônicas/covalentes, energias típicas da ordem de 1 a 5 eV, ligações fortes.

Ligação de Van der Waals

- ▶ As ligações iônicas/covalentes, energias típicas da ordem de 1 a 5 eV, ligações fortes.
- ▶ **Ligações de Van der Waals**, é uma interação entre o momento de dipolo elétrico dos átomos ou das moléculas, com energias típicas da ordem de 0,1 eV ou ainda menores (ligações fracas).

Ligação de Van der Waals

- ▶ As ligações iônicas/covalentes, energias típicas da ordem de 1 a 5 eV, ligações fortes.
- ▶ **Ligações de Van der Waals**, é uma interação entre o momento de dipolo elétrico dos átomos ou das moléculas, com energias típicas da ordem de 0,1 eV ou ainda menores (ligações fracas).

$$V(r) = U_0 \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

Ligação de Van der Waals

- ▶ As ligações iônicas/covalentes, energias típicas da ordem de 1 a 5 eV, ligações fortes.
- ▶ **Ligações de Van der Waals**, é uma interação entre o momento de dipolo elétrico dos átomos ou das moléculas, com energias típicas da ordem de 0,1 eV ou ainda menores (ligações fracas).

$$V(r) = U_0 \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

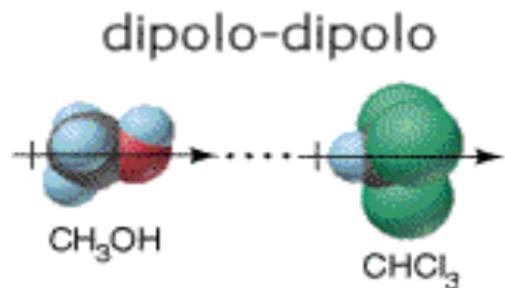
Ligação de Van der Waals

- ▶ As ligações iônicas/covalentes, energias típicas da ordem de 1 a 5 eV, ligações fortes.
- ▶ **Ligações de Van der Waals**, é uma interação entre o momento de dipolo elétrico dos átomos ou das moléculas, com energias típicas da ordem de 0,1 eV ou ainda menores (ligações fracas).

$$V(r) = U_0 \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

Ligação de Van der Waals

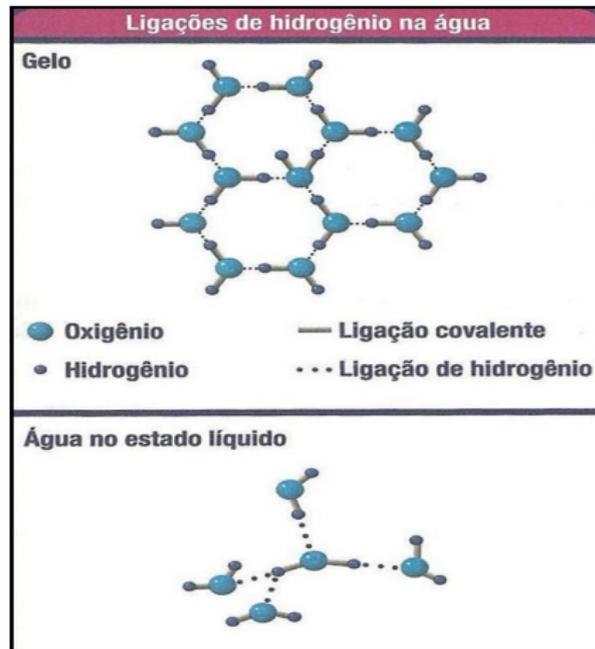
- ▶ As ligações iônicas/covalentes, energias típicas da ordem de 1 a 5 eV, ligações fortes.
- ▶ **Ligações de Van der Waals**, é uma interação entre o momento de dipolo elétrico dos átomos ou das moléculas, com energias típicas da ordem de 0,1 eV ou ainda menores (ligações fracas).



$$V(r) = U_0 \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

Ligação de hidrogênio

- ▶ Na Ligação de hidrogênio, um proton (ion H^+) permanece entre dois átomos polarizando-os e os atraindo por meio dos dipolos induzidos.

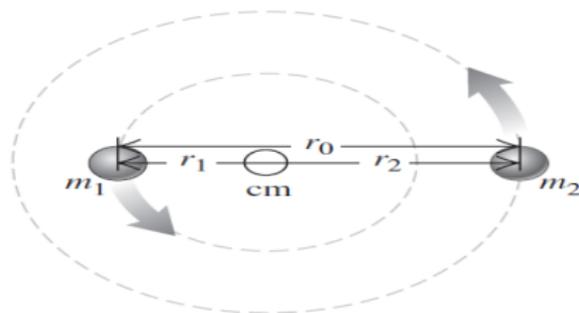


Níveis de energia de rotação

- ▶ As moléculas possuem níveis de energia que são associados ao movimento de rotação da molécula e ao movimento de vibração de um átomo em relação aos outros.

Níveis de energia de rotação

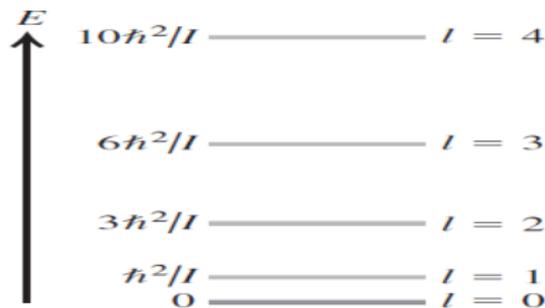
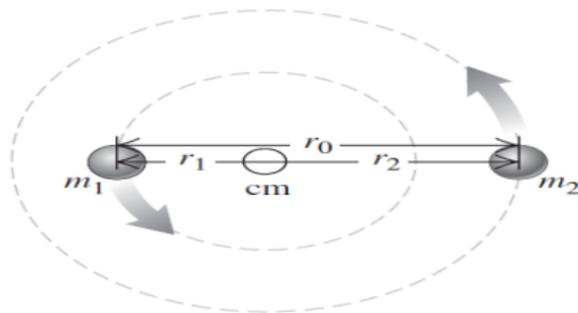
- ▶ As moléculas possuem níveis de energia que são associados ao movimento de rotação da molécula e ao movimento de vibração de um átomo em relação aos outros.
- ▶ Considere uma molécula diatômica como se fosse rígida.



Níveis de energia de rotação

- ▶ As moléculas possuem níveis de energia que são associados ao movimento de rotação da molécula e ao movimento de vibração de um átomo em relação aos outros.
- ▶ Considere uma molécula diatômica como se fosse rígida.

$$E_l = \frac{L^2}{2I} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I} \quad (1)$$

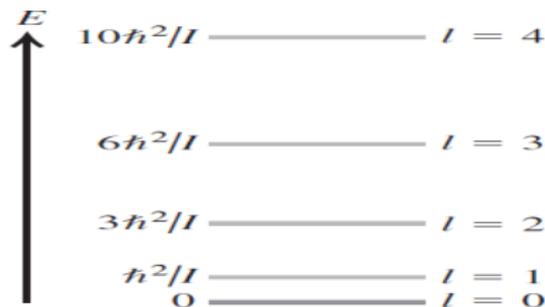
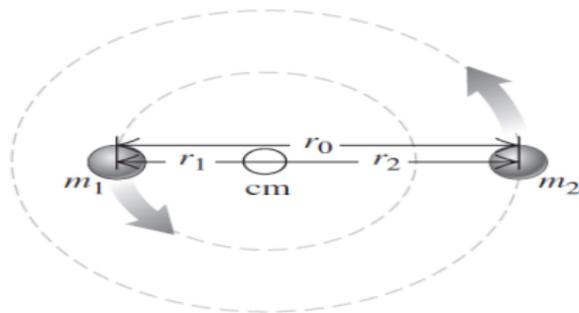


Níveis de energia de rotação

- ▶ As moléculas possuem níveis de energia que são associados ao movimento de rotação da molécula e ao movimento de vibração de um átomo em relação aos outros.
- ▶ Considere uma molécula diatômica como se fosse rígida.

$$E_l = \frac{L^2}{2I} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I} \quad (1)$$

$$I = m_r r_0^2 \quad (2)$$



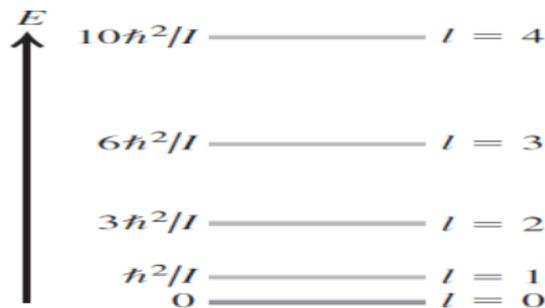
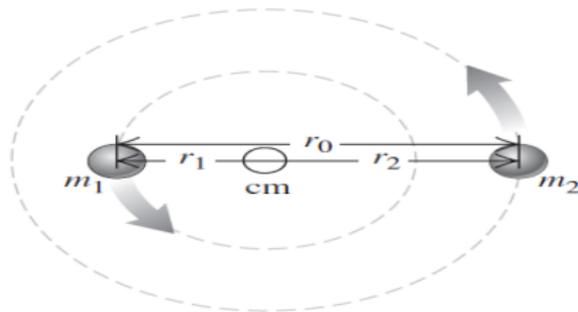
Níveis de energia de rotação

- ▶ As moléculas possuem níveis de energia que são associados ao movimento de rotação da molécula e ao movimento de vibração de um átomo em relação aos outros.
- ▶ Considere uma molécula diatômica como se fosse rígida.

$$E_l = \frac{L^2}{2I} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I} \quad (1)$$

$$I = m_r r_0^2$$

$$m_r = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

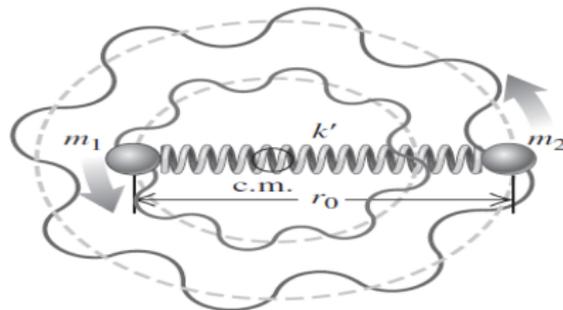


Níveis de energia de vibração

- ▶ Considere agora uma molécula diatômica não rígida.

Níveis de energia de vibração

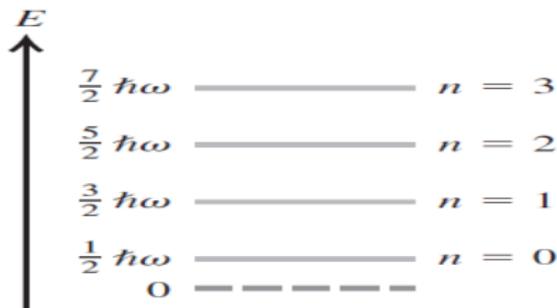
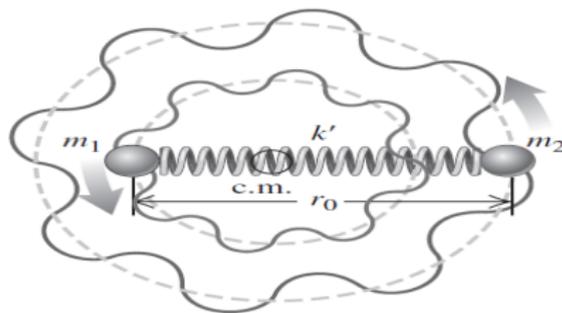
- ▶ Considere agora uma molécula diatômica não rígida.



Níveis de energia de vibração

- Considere agora uma molécula diatômica não rígida.

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) = \hbar\sqrt{\frac{k'}{m_r}} \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (2)$$

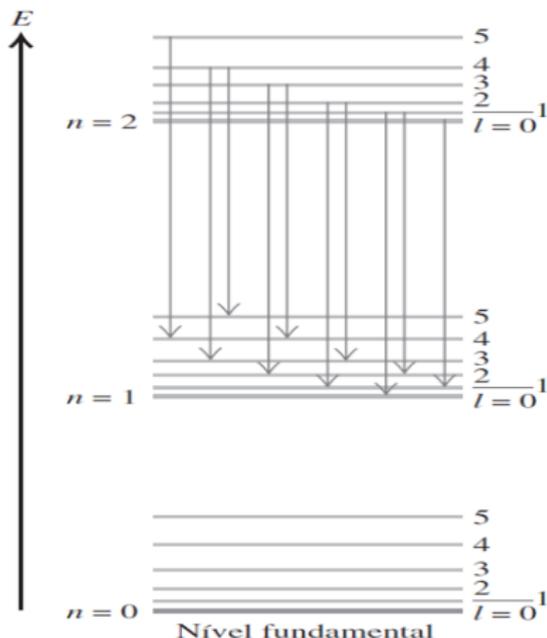


Níveis de energia de vibração

- Considere agora uma molécula diatômica não rígida.

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) = \hbar\sqrt{\frac{k'}{m_r}} \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

$$E_{nl} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I} + \hbar\sqrt{\frac{k'}{m_r}} \left(n + \frac{1}{2} \right)$$



Níveis de energia de vibração

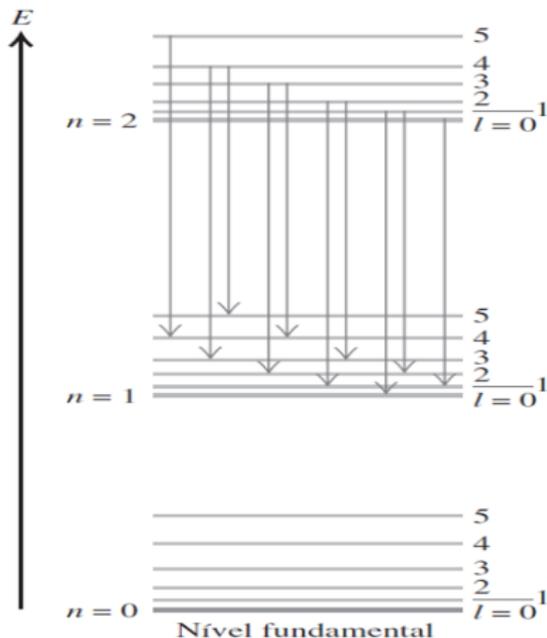
- ▶ Considere agora uma molécula diatômica não rígida.

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) = \hbar\sqrt{\frac{k'}{m_r}} \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

$$E_{nl} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I} + \hbar\sqrt{\frac{k'}{m_r}} \left(n + \frac{1}{2} \right)$$



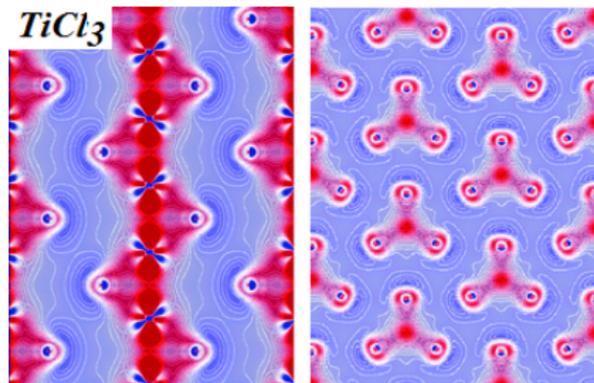
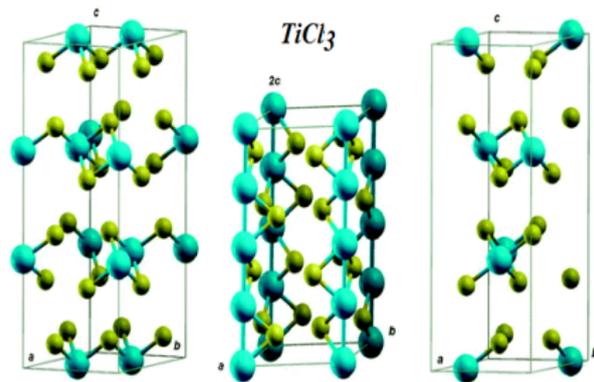
Espectro de bandas típico para transições entre níveis moleculares.



- ▶ A expressão **materia condensada** abrange materiais sólidos e líquidos.

└ Estrutura de um Sólido

- ▶ A expressão **materia condensada** abrange materiais sólidos e líquidos.
- ▶ Na materia condensada os átomos adjacentes se atraem mutuamente até que suas **nuvens eletrônicas externas se superpõem**.



└ Estrutura de um Sólido

- ▶ A expressão **materia condensada** abrange materiais sólidos e líquidos.
- ▶ Na materia condensada os átomos adjacentes se atraem mutuamente até que suas **nuvens eletrônicas externas** se **superpõem**.
- ▶ Quais são as diferenças microscópicas entre materiais como a **manteiga ou o vidro** e sólidos tais como o **gelo ou o cobre**, os quais possuem um ponto de fusão bem definido?

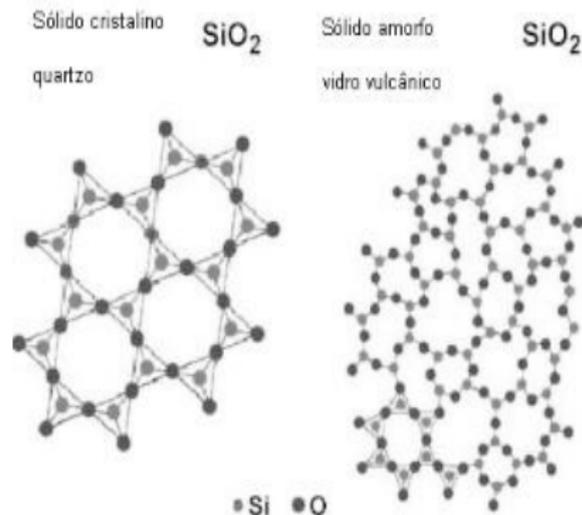
Estrutura de um Sólido

- ▶ A expressão **materia condensada** abrange materiais sólidos e líquidos.
- ▶ Na materia condensada os átomos adjacentes se atraem mutuamente até que suas **nuvens eletrônicas externas se superpõem**.
- ▶ Quais são as diferenças microscópicas entre materiais como a **manteiga ou o vidro** e sólidos tais como o **gelo ou o cobre**, os quais possuem um ponto de fusão bem definido?
- ▶ O gelo e o cobre são exemplos de **sólidos cristalinos**, sólidos cujos átomos tem uma **ordem de longo alcance**.



└ Estrutura de um Sólido

- ▶ A expressão **materia condensada** abrange materiais sólidos e líquidos.
- ▶ Na materia condensada os átomos adjacentes se atraem mutuamente até que suas **nuvens eletrônicas externas** se **superpõem**.
- ▶ Quais são as diferenças microscópicas entre materiais como a **manteiga ou o vidro** e sólidos tais como o **gelo ou o cobre**, os quais possuem um ponto de fusão bem definido?
- ▶ O gelo e o cobre são exemplos de **sólidos cristalinos**, sólidos cujos átomos tem uma **ordem de longo alcance**.
- ▶ O vidro na temperatura ambiente é um exemplo de **sólido amorfo**, sem ordem de longo alcance e com apenas uma **ordem de curto alcance**.

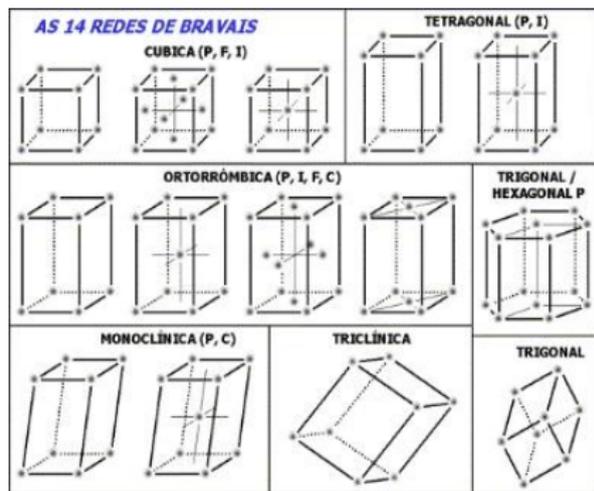


Redes e estruturas cristalinas

- ▶ Uma rede cristalina é uma configuração geométrica de pontos que se repetem e se estendem através do espaço do cristal.

Redes e estruturas cristalinas

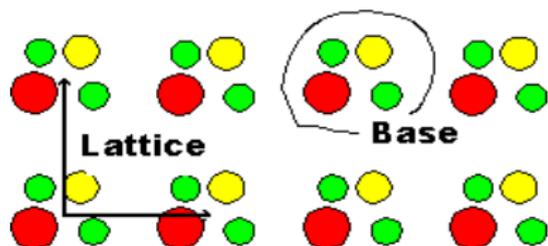
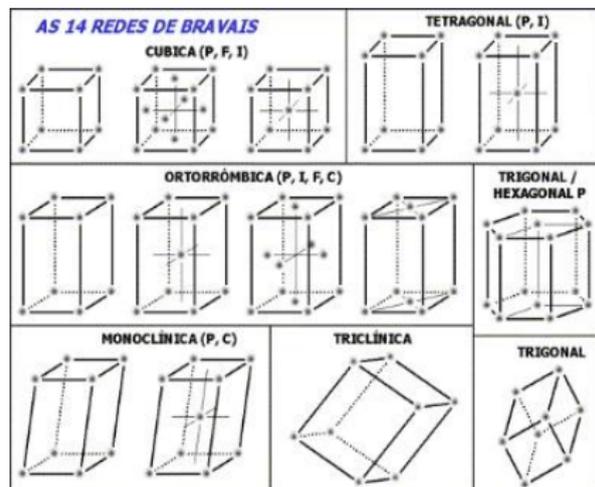
- ▶ Uma rede cristalina é uma configuração geométrica de pontos que se repetem e se estendem através do espaço do cristal.
- ▶ Existem 14 tipos gerais de redes configurações.



Estrutura de um Sólido

Redes e estruturas cristalinas

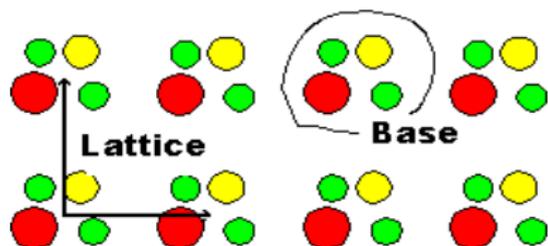
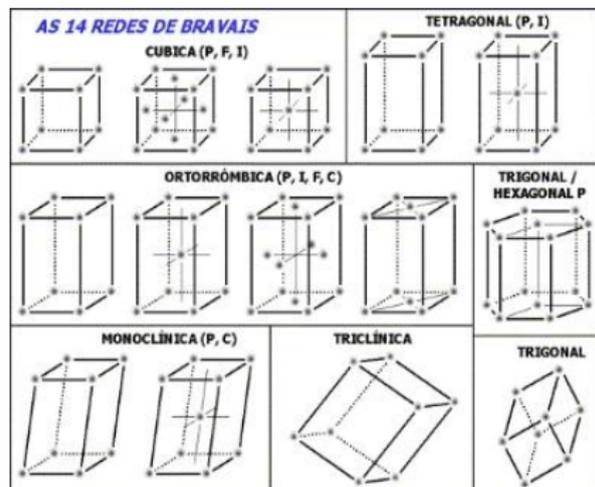
- ▶ Uma rede cristalina é uma configuração geométrica de pontos que se repetem e se estendem através do espaço do cristal.
- ▶ Existem 14 tipos gerais de redes configurações.
- ▶ Em uma **estrutura cristalina**, um **único átomo** ou um **grupo de átomos** esta associado a cada ponto da rede.



Estrutura de um Sólido

Redes e estruturas cristalinas

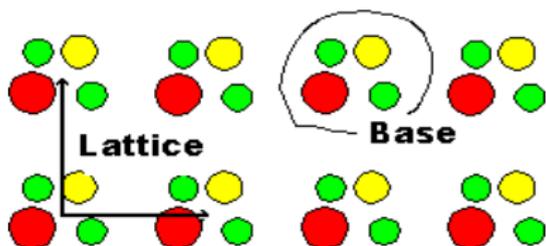
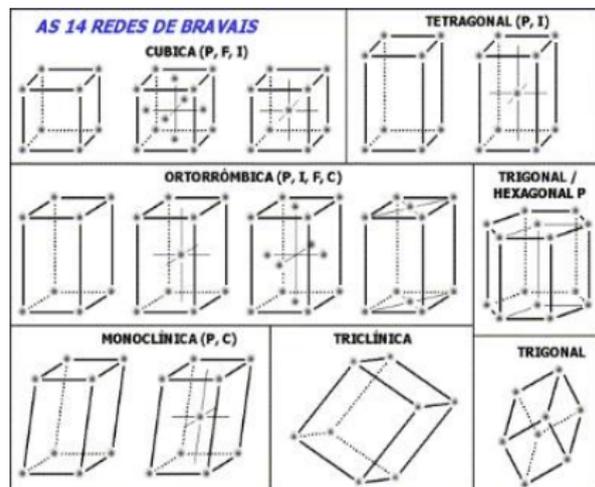
- ▶ Uma rede cristalina é uma configuração geométrica de pontos que se repetem e se estendem através do espaço do cristal.
- ▶ Existem 14 tipos gerais de redes configurações.
- ▶ Em uma **estrutura cristalina**, um **único átomo** ou um **grupo de átomos** esta associado a cada ponto da rede.
- ▶ Esse grupo de átomos constitui uma **base**.



Estrutura de um Sólido

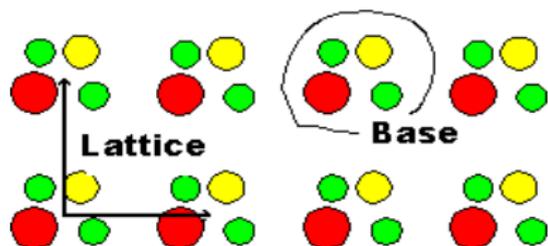
Redes e estruturas cristalinas

- ▶ Uma rede cristalina é uma configuração geométrica de pontos que se repetem e se estendem através do espaço do cristal.
- ▶ Existem 14 tipos gerais de redes configurações.
- ▶ Em uma **estrutura cristalina**, um **único átomo** ou um **grupo de átomos** esta associado a cada ponto da rede.
- ▶ Esse grupo de átomos constitui uma **base**.
- ▶ Uma descrição completa de uma **estrutura cristalina** inclui a **rede e a base**.



Redes e estruturas cristalinas

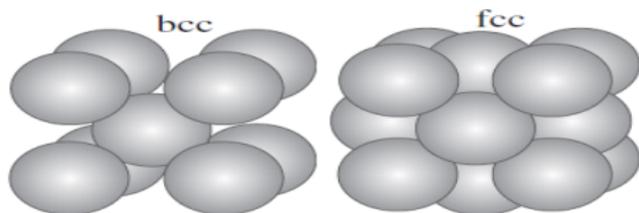
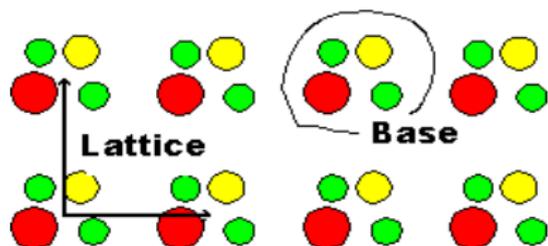
- ▶ Uma rede cristalina é uma configuração geométrica de pontos que se repetem e se estendem através do espaço do cristal.
- ▶ Existem 14 tipos gerais de redes configurações.
- ▶ Em uma **estrutura cristalina**, um **único átomo** ou um **grupo de átomos** esta associado a cada ponto da rede.
- ▶ Esse grupo de átomos constitui uma **base**.
- ▶ Uma descrição completa de uma **estrutura cristalina** inclui a **rede e a base**.



└ Estrutura de um Sólido

Redes e estruturas cristalinas

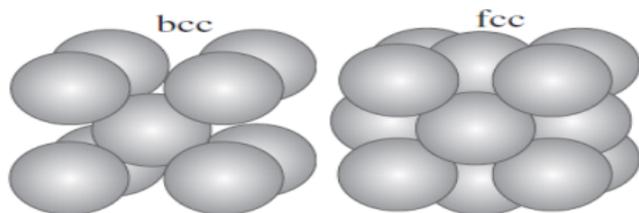
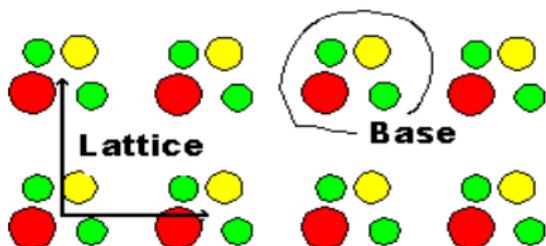
- ▶ Uma rede cristalina é uma configuração geométrica de pontos que se repetem e se estendem através do espaço do cristal.
- ▶ Existem 14 tipos gerais de redes configurações.
- ▶ Em uma **estrutura cristalina**, um **único átomo** ou um **grupo de átomos** esta associado a cada ponto da rede.
- ▶ Esse grupo de átomos constitui uma **base**.
- ▶ Uma descrição completa de uma **estrutura cristalina** inclui a **rede e a base**.
- ▶ Um *crystal perfeito* ou *monocristal ideal*, é uma estrutura cristalina que se repete ininterruptamente ao longo do espaço do cristal.
- ▶ As 2 estruturas cristalinas mais comuns dos monocristais são a bcc e a fcc.



Estrutura de um Sólido

Redes e estruturas cristalinas

- ▶ Uma rede cristalina é uma configuração geométrica de pontos que se repetem e se estendem através do espaço do cristal.
- ▶ Existem 14 tipos gerais de redes configurações.
- ▶ Em uma **estrutura cristalina**, um **único átomo** ou um **grupo de átomos** esta associado a cada ponto da rede.
- ▶ Esse grupo de átomos constitui uma **base**.
- ▶ Uma descrição completa de uma **estrutura cristalina** inclui a **rede e a base**.
- ▶ Um *crystal perfeito* ou *monocrystal ideal*, é uma estrutura cristalina que se repete ininterruptamente ao longo do espaço do cristal.
- ▶ As 2 estruturas cristalinas mais comuns dos monocristais são a bcc e a fcc.
- ▶ Os elementos **Al**, **Ca**, **Cu**, **Ag** e **Au** tem uma estrutura fcc.



Ligação nos sólidos e Tipos de cristais

- ▶ **Cristais iônicos** são sólidos na qual as ligações são iônicas.

Ligação nos sólidos e Tipos de cristais

- ▶ **Cristais iônicos** são sólidos na qual as ligações são iônicas.
- ▶ Forças não possuem uma direção fixa, e o arranjo que o material se cristaliza depende do tamanho relativo dos dois ions.

Ligação nos sólidos e Tipos de cristais

- ▶ **Cristais iônicos** são sólidos na qual as ligações são iônicas.
- ▶ Forças não possuem uma direção fixa, e o arranjo que o material se cristaliza depende do tamanho relativo dos dois ions.
- ▶ **Cristais covalentes** são sólidos na qual as ligações são covalentes.

Ligação nos sólidos e Tipos de cristais

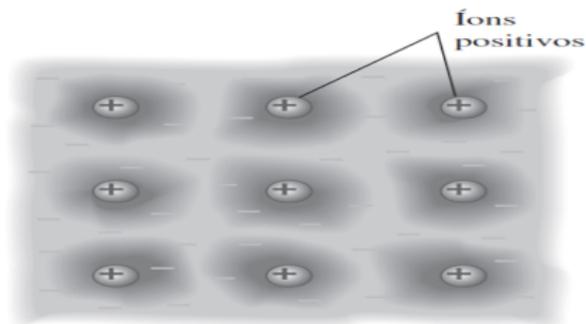
- ▶ **Cristais iônicos** são sólidos na qual as ligações são iônicas.
- ▶ Forças não possuem uma direção fixa, e o arranjo que o material se cristaliza depende do tamanho relativo dos dois ions.
- ▶ **Cristais covalentes** são sólidos na qual as ligações são covalentes.
- ▶ Forças fortemente direcionais porque, em obediência ao princípio da exclusão, ocorre uma distribuição assimétrica de elétrons.

Ligação nos sólidos e Tipos de cristais

- ▶ **Cristais iônicos** são sólidos na qual as ligações são iônicas.
- ▶ Forças não possuem uma direção fixa, e o arranjo que o material se cristaliza depende do tamanho relativo dos dois ions.
- ▶ **Cristais covalentes** são sólidos na qual as ligações são covalentes.
- ▶ Forças fortemente direcionais porque, em obediência ao princípio da exclusão, ocorre uma distribuição assimétrica de elétrons.
- ▶ O **cristal metálico** e um 3º tipo não relacionado com as ligações químicas dos cristais iônicos e um cristal molecular.

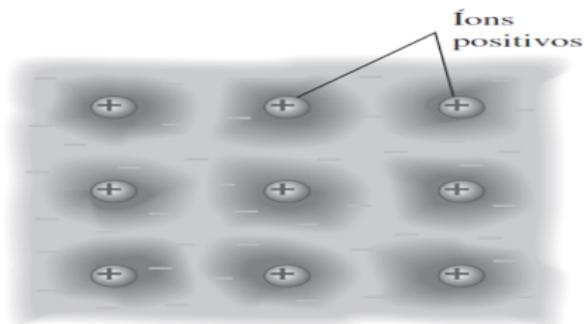
Ligação nos sólidos e Tipos de cristais

- ▶ **Cristais iônicos** são sólidos na qual as ligações são iônicas.
- ▶ Forças não possuem uma direção fixa, e o arranjo que o material se cristaliza depende do tamanho relativo dos dois ions.
- ▶ **Cristais covalentes** são sólidos na qual as ligações são covalentes.
- ▶ Forças fortemente direcionais porque, em obediência ao princípio da exclusão, ocorre uma distribuição assimétrica de elétrons.
- ▶ O **crystal metálico** e um 3º tipo não relacionado com as ligações químicas dos cristais iônicos e um cristal molecular.
- ▶ Uma rede de ions positivos imersa em um mar de **elétrons livres** cujas atrações pelos ions positivos mantém o cristal unido.



Ligação nos sólidos e Tipos de cristais

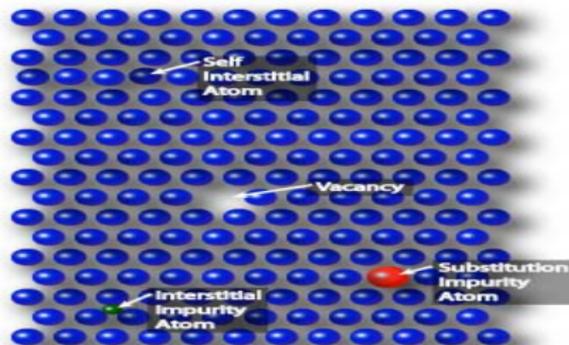
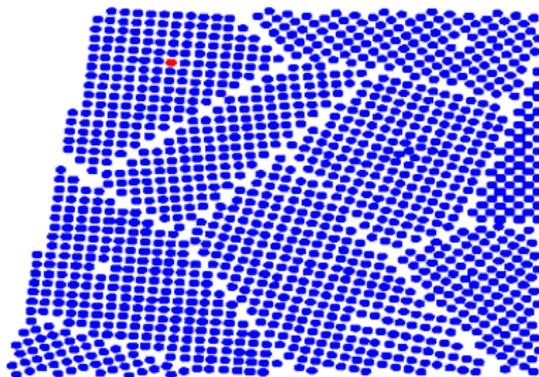
- ▶ **Cristais iônicos** são sólidos na qual as ligações são iônicas.
- ▶ Forças não possuem uma direção fixa, e o arranjo que o material se cristaliza depende do tamanho relativo dos dois ions.
- ▶ **Cristais covalentes** são sólidos na qual as ligações são covalentes.
- ▶ Forças fortemente direcionais porque, em obediência ao princípio da exclusão, ocorre uma distribuição assimétrica de elétrons.
- ▶ O **crystal metálico** e um 3º tipo não relacionado com as ligações químicas dos cristais iônicos e um cristal molecular.
- ▶ Uma rede de ions positivos imersa em um mar de **elétrons livres** cujas atrações pelos ions positivos mantém o cristal unido.



- ▶ Esses elétrons são responsáveis pela elevada condutividade elétrica e térmica dos metais.
- ▶ O mar de elétrons possui muitas propriedades dos gases e, na verdade, dizemos que se trata do **modelo do gás de elétrons** para um sólido metálico.
- ▶ O **modelo de elétrons livres**, despreza completamente a interação com os ions da rede (exceto na superfície).

Ligação nos sólidos e Tipos de cristais

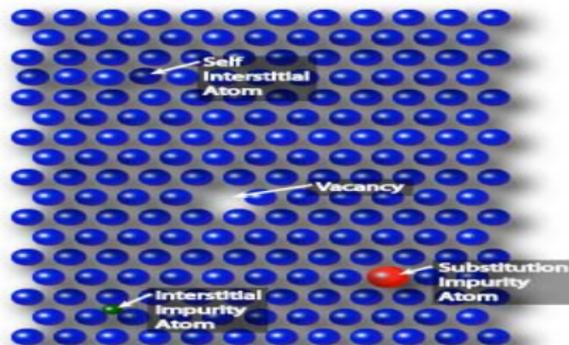
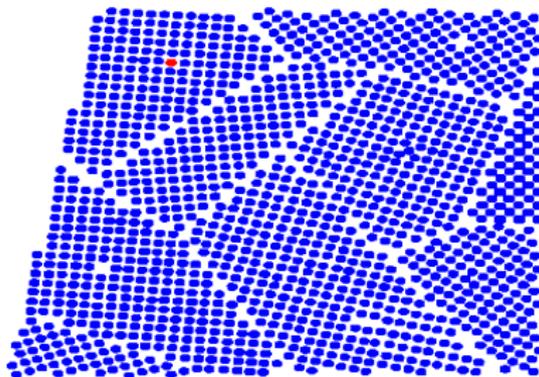
- ▶ Um cristal real apresenta diversos desvios em relação a estrutura ideal.



Estrutura de um Sólido

Ligação nos sólidos e Tipos de cristais

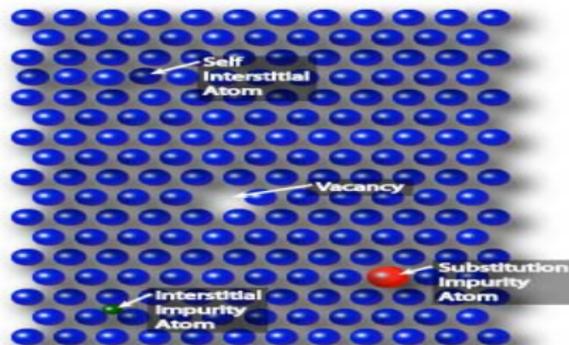
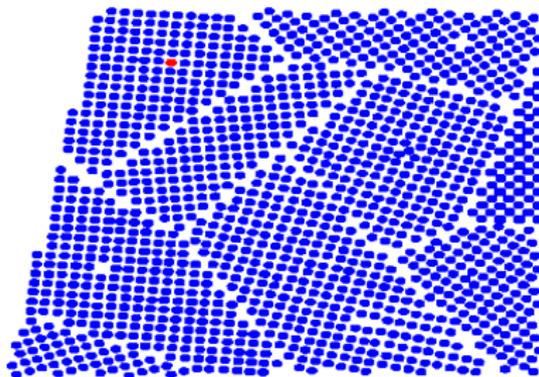
- ▶ Um cristal real apresenta diversos desvios em relação a estrutura ideal.
- ▶ Os materiais são *poli-cristalinos*, compostos por **vários mono-cristais** ligados por meio dos contornos de grão.



└ Estrutura de um Sólido

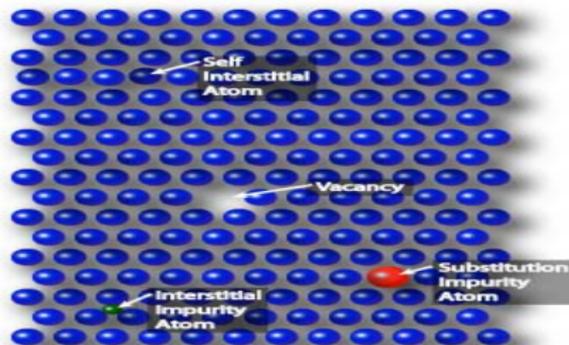
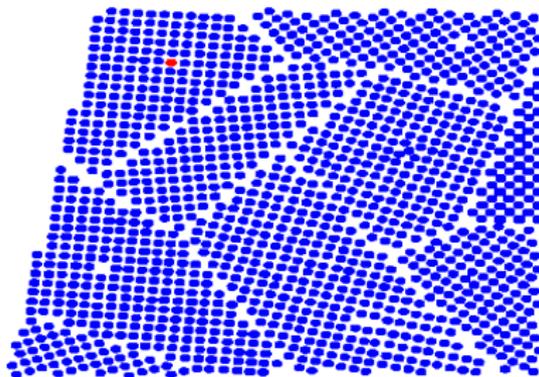
Ligação nos sólidos e Tipos de cristais

- ▶ Um cristal real apresenta diversos desvios em relação a estrutura ideal.
- ▶ Os materiais são *poli-cristalinos*, compostos por **vários mono-cristais** ligados por meio dos contornos de grão.
- ▶ Em um cristal podem surgir átomos intersticiais em locais que não pertencem.



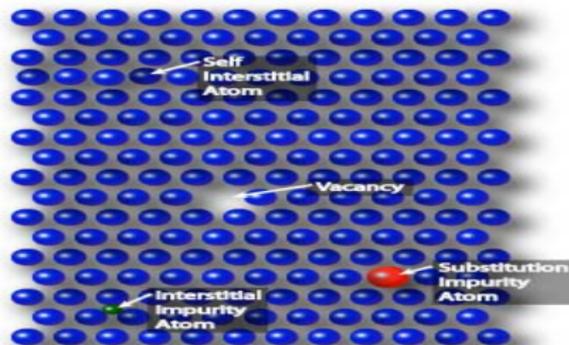
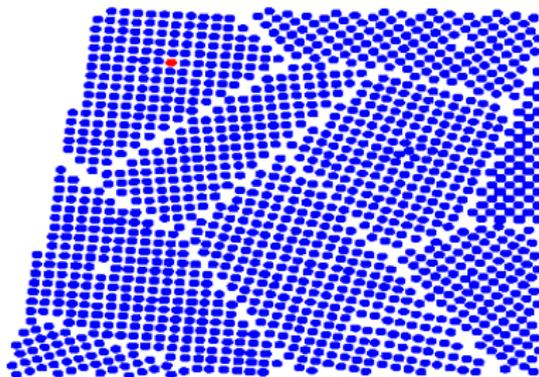
Ligação nos sólidos e Tipos de cristais

- ▶ Um cristal real apresenta diversos desvios em relação a estrutura ideal.
- ▶ Os materiais são *poli-cristalinos*, compostos por **vários mono-cristais** ligados por meio dos contornos de grão.
- ▶ Em um cristal podem surgir átomos intersticiais em locais que não pertencem.
- ▶ Vacâncias, posições que deveriam ser ocupadas por um átomo, mas que estão vazias.



Ligação nos sólidos e Tipos de cristais

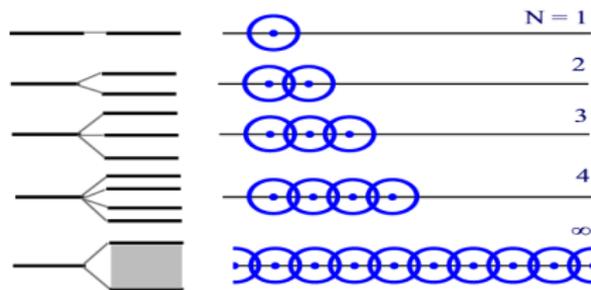
- ▶ Um cristal real apresenta diversos desvios em relação a estrutura ideal.
- ▶ Os materiais são *poli-cristalinos*, compostos por **vários mono-cristais** ligados por meio dos contornos de grão.
- ▶ Em um cristal podem surgir átomos intersticiais em locais que não pertencem.
- ▶ Vacâncias, posições que deveriam ser ocupadas por um átomo, mas que estão vazias.
- ▶ Um defeito pontual de interesse particular para os semicondutores, é a impureza substitucional.



└ Bandas de Energia

Bandas de Energia

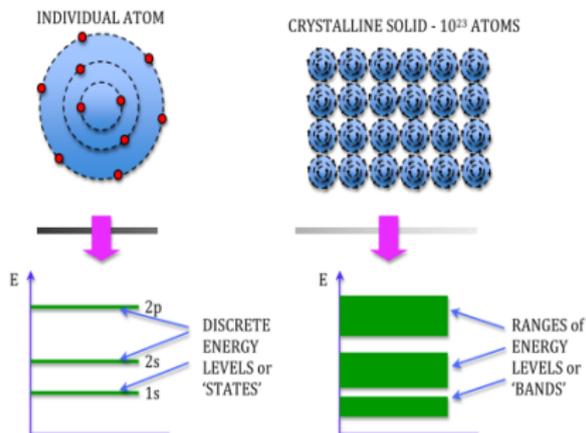
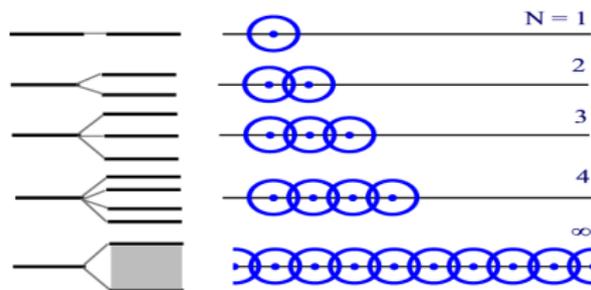
- ▶ O conceito de bandas de energia foi desenvolvido em 1928 por Felix Bloch.
- ▶ Considere um número N muito grande de átomos tão afastados que possamos desprezar a interação entre eles.



Bandas de Energia

Bandas de Energia

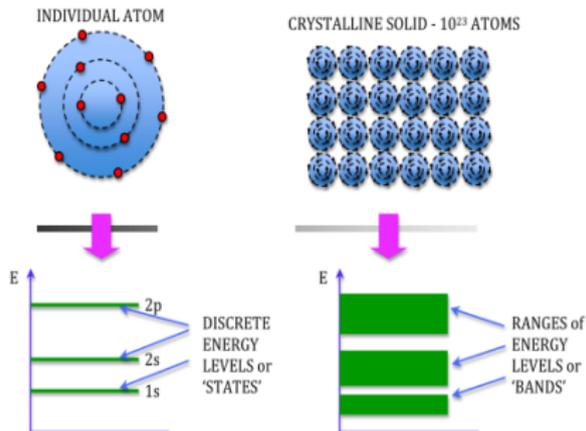
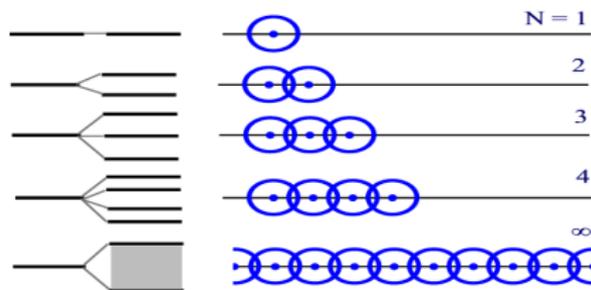
- ▶ O conceito de bandas de energia foi desenvolvido em 1928 por Felix Bloch.
- ▶ Considere um número N muito grande de átomos tão afastados que possamos desprezar a interação entre eles.
- ▶ Cada átomo possui o mesmo diagrama de níveis de energia.



Bandas de Energia

Bandas de Energia

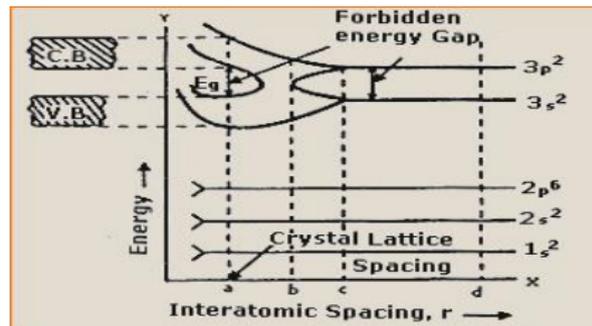
- ▶ O conceito de bandas de energia foi desenvolvido em 1928 por Felix Bloch.
- ▶ Considere um número N muito grande de átomos tão afastados que possamos desprezar a interação entre eles.
- ▶ Cada átomo possui o mesmo diagrama de níveis de energia.
- ▶ A medida que eles se aproximam os níveis de energia mudam.



└ Bandas de Energia

Bandas de Energia

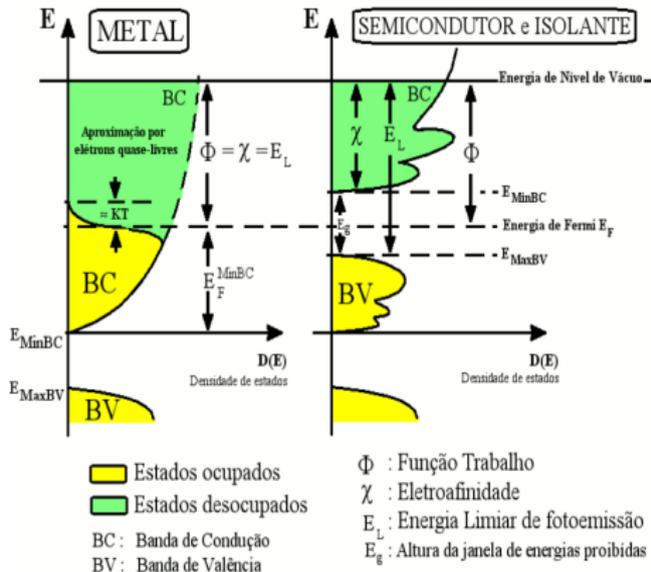
- ▶ O conceito de bandas de energia foi desenvolvido em 1928 por Felix Bloch.
- ▶ Considere um número N muito grande de átomos tão afastados que possamos desprezar a interação entre eles.
- ▶ Cada átomo possui o mesmo diagrama de níveis de energia.
- ▶ A medida que eles se aproximam os níveis de energia mudam.
- ▶ Para obter o **diagrama de níveis do cristal** devemos aplicar o **princípio da exclusão** ao sistema.



Bandas de Energia

Bandas de Energia

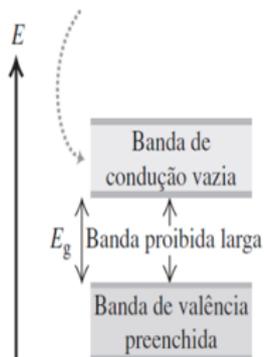
- ▶ O conceito de bandas de energia foi desenvolvido em 1928 por Felix Bloch.
- ▶ Considere um número N muito grande de átomos tão afastados que possamos desprezar a interação entre eles.
- ▶ Cada átomo possui o mesmo diagrama de níveis de energia.
- ▶ A medida que eles se aproximam os níveis de energia mudam.
- ▶ Para obter o **diagrama de níveis do cristal** devemos aplicar o **princípio da exclusão** ao sistema.



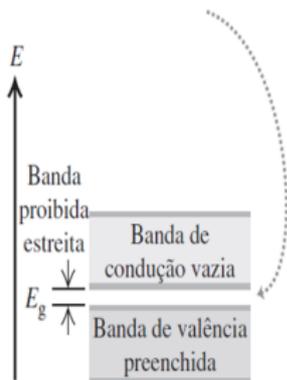
└ Bandas de Energia

Isolantes, semicondutores e condutores

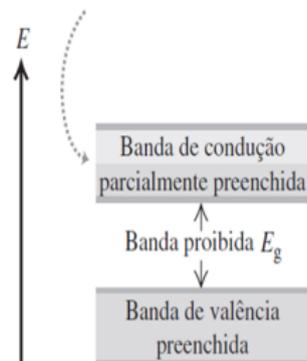
Em um isolante no zero absoluto, não existem elétrons na banda de condução.



Um semicondutor tem a mesma estrutura de banda que um isolante, mas uma banda proibida menor entre a banda de valência e a banda de condução.



Um condutor apresenta uma banda de condução parcialmente preenchida.



└ Modelo do Elétron Livre para um Metal

Modelo do Elétron Livre para um Metal

- ▶ Neste modelo supomos que os elétrons estejam completamente livres no interior do material.

└ Modelo do Elétron Livre para um Metal

Modelo do Elétron Livre para um Metal

- ▶ Neste modelo supomos que os elétrons estejam completamente livres no interior do material.
- ▶ Não existe interação mútua e não interajam de forma alguma com os ions.

└ Modelo do Elétron Livre para um Metal

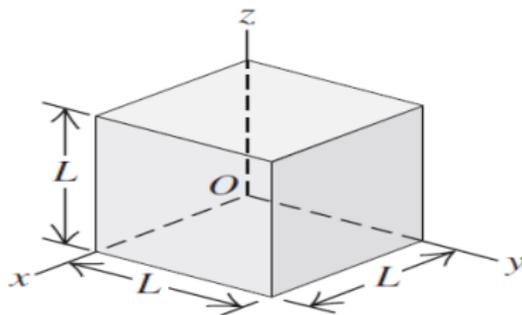
Modelo do Elétron Livre para um Metal

- ▶ Neste modelo supomos que os elétrons estejam completamente livres no interior do material.
- ▶ Não existe interação mútua e não interajam de forma alguma com os ions.
- ▶ Somente existe uma barreira de potencial infinita na superfície do metal.

└ Modelo do Elétron Livre para um Metal

Modelo do Elétron Livre para um Metal

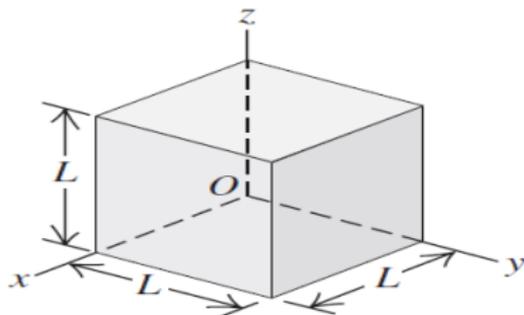
- ▶ Neste modelo supomos que os elétrons estejam completamente livres no interior do material.
- ▶ Não existe interação mutua e não interajam de forma alguma com os ions.
- ▶ Somente existe uma barreira de potencial infinita na superfície do metal.
- ▶ Considere uma caixa cúbica com aresta de comprimento L . As funções de onda são:



└ Modelo do Elétron Livre para um Metal

Modelo do Elétron Livre para um Metal

- ▶ Neste modelo supomos que os elétrons estejam completamente livres no interior do material.
- ▶ Não existe interação mutua e não interajam de forma alguma com os íons.
- ▶ Somente existe uma barreira de potencial infinita na superfície do metal.
- ▶ Considere uma caixa cúbica com aresta de comprimento L . As funções de onda são:



$$\psi(x, y, z) = A \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{L}\right) \sin\left(\frac{n_z \pi z}{L}\right)$$

- ▶ Onde (n_x, n_y, n_z) é um conjunto de números quânticos que identificam o estado, e as energias são:

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

Densidade de estados

- ▶ Precisaremos saber o número dn de estados quânticos com energias em um intervalo de energia dE .

Densidade de estados

- ▶ Precisaremos saber o número dn de estados quânticos com energias em um intervalo de energia dE .
- ▶ O número de estados quânticos por unidade de intervalo de energia denomina-se **densidade de estados**, definida por:

$$g(E) = \frac{dn}{dE}$$

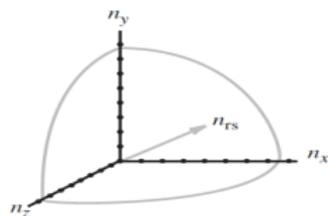
Modelo do Elétron Livre para um Metal

Densidade de estados

- Precisaremos saber o número dn de estados quânticos com energias em um intervalo de energia dE .
- O número de estados quânticos por unidade de intervalo de energia denomina-se **densidade de estados**, definida por:

$$g(E) = \frac{dn}{dE}$$

- Imagine um espaço tridimensional com as coordenadas (n_x, n_y, n_z) .



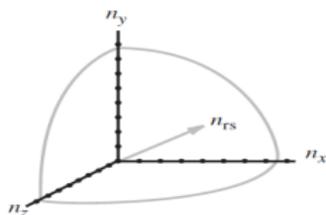
Modelo do Elétron Livre para um Metal

Densidade de estados

- Precisaremos saber o número dn de estados quânticos com energias em um intervalo de energia dE .
- O número de estados quânticos por unidade de intervalo de energia denomina-se **densidade de estados**, definida por:

$$g(E) = \frac{dn}{dE}$$

- Imagine um espaço tridimensional com as coordenadas (n_x, n_y, n_z) .
- O raio n_{rs} de uma esfera centralizada na origem naquele espaço é $n_{rs} = \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}$.
- Cada ponto corresponde a uma unidade de volume naquele espaço.
- O número total de pontos com coordenadas inteiras dentro da esfera é igual a $\frac{1}{8} \frac{4}{3} \pi n_{rs}^3$.



- As partículas são elétrons, de modo que cada ponto corresponde a dois estados com spins opostos.

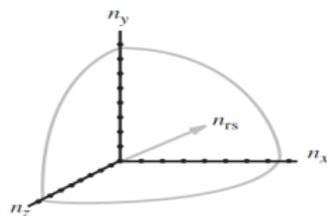
Modelo do Elétron Livre para um Metal

Densidade de estados

- Precisaremos saber o número dn de estados quânticos com energias em um intervalo de energia dE .
- O número de estados quânticos por unidade de intervalo de energia denomina-se **densidade de estados**, definida por:

$$g(E) = \frac{dn}{dE}$$

- Imagine um espaço tridimensional com as coordenadas (n_x, n_y, n_z) .
- O raio n_{rs} de uma esfera centralizada na origem naquele espaço é $n_{rs} = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$.
- Cada ponto corresponde a uma unidade de volume naquele espaço.
- O número total de pontos com coordenadas inteiras dentro da esfera é igual a $\frac{1}{8} \frac{4}{3} \pi n_{rs}^3$.



- As partículas são elétrons, de modo que cada ponto corresponde a dois estados com spins opostos.
- O número total n de estados eletrônicos correspondentes a pontos no interior de um oitavo do volume da esfera é o dobro, logo:

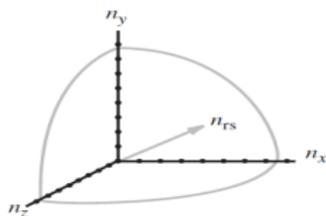
└ Modelo do Elétron Livre para um Metal

Densidade de estados

- Precisaremos saber o número dn de estados quânticos com energias em um intervalo de energia dE .
- O número de estados quânticos por unidade de intervalo de energia denomina-se **densidade de estados**, definida por:

$$g(E) = \frac{dn}{dE}$$

- Imagine um espaço tridimensional com as coordenadas (n_x, n_y, n_z) .
- O raio n_{rs} de uma esfera centralizada na origem naquele espaço é $n_{rs} = \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}$.
- Cada ponto corresponde a uma unidade de volume naquele espaço.
- O número total de pontos com coordenadas inteiras dentro da esfera é igual a $\frac{1}{8} \frac{4}{3} \pi n_{rs}^3$.



- As partículas são elétrons, de modo que cada ponto corresponde a dois estados com spins opostos.
- O número total n de estados eletrônicos correspondentes a pontos no interior de um oitavo do volume da esfera é o dobro, logo:

$$n = \frac{2}{8} \frac{4}{3} \pi n_{rs}^3 = \frac{1}{3} \pi n_{rs}^3 \quad (2)$$

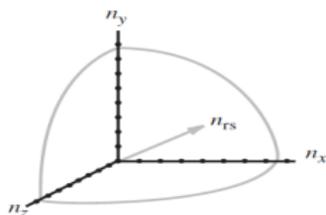
Modelo do Elétron Livre para um Metal

Densidade de estados

- Precisaremos saber o número dn de estados quânticos com energias em um intervalo de energia dE .
- O número de estados quânticos por unidade de intervalo de energia denomina-se **densidade de estados**, definida por:

$$g(E) = \frac{dn}{dE}$$

- Imagine um espaço tridimensional com as coordenadas (n_x, n_y, n_z) .
- O raio n_{rs} de uma esfera centralizada na origem naquele espaço é $n_{rs} = \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}$.
- Cada ponto corresponde a uma unidade de volume naquele espaço.
- O número total de pontos com coordenadas inteiras dentro da esfera é igual a $\frac{1}{8} \frac{4}{3} \pi n_{rs}^3$.



- As partículas são elétrons, de modo que cada ponto corresponde a dois estados com spins opostos.
- O número total n de estados eletrônicos correspondentes a pontos no interior de um oitavo do volume da esfera é o dobro, logo:

$$n = \frac{2}{8} \frac{4}{3} \pi n_{rs}^3 = \frac{1}{3} \pi n_{rs}^3$$

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{n_{rs}^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \quad (2)$$

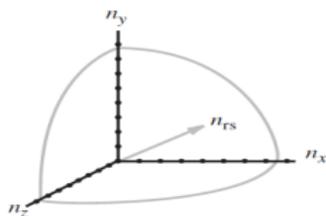
Modelo do Elétron Livre para um Metal

Densidade de estados

- Precisaremos saber o número dn de estados quânticos com energias em um intervalo de energia dE .
- O número de estados quânticos por unidade de intervalo de energia denomina-se **densidade de estados**, definida por:

$$g(E) = \frac{dn}{dE}$$

- Imagine um espaço tridimensional com as coordenadas (n_x, n_y, n_z) .
- O raio n_{rs} de uma esfera centralizada na origem naquele espaço é $n_{rs} = \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}$.
- Cada ponto corresponde a uma unidade de volume naquele espaço.
- O número total de pontos com coordenadas inteiras dentro da esfera é igual a $\frac{1}{8} \frac{4}{3} \pi n_{rs}^3$.



- As partículas são elétrons, de modo que cada ponto corresponde a dois estados com spins opostos.
- O número total n de estados eletrônicos correspondentes a pontos no interior de um oitavo do volume da esfera é o dobro, logo:

$$n = \frac{2}{8} \frac{4}{3} \pi n_{rs}^3 = \frac{1}{3} \pi n_{rs}^3$$

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{n_{rs}^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

$$n = \frac{(2m)^{3/2} L^3 E^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3}$$

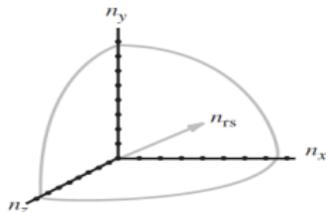
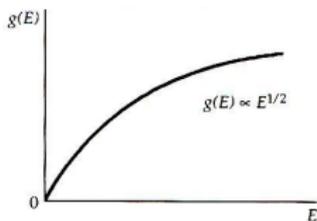
└ Modelo do Elétron Livre para um Metal

Densidade de estados

- Precisaremos saber o número dn de estados quânticos com energias em um intervalo de energia dE .
- O número de estados quânticos por unidade de intervalo de energia denomina-se **densidade de estados**, definida por:

$$g(E) = \frac{dn}{dE}$$

$$g(E) = \frac{dn}{dE} = \frac{(2m)^{3/2} V}{2\pi^2 \hbar^3} E^{1/2}$$



- As partículas são elétrons, de modo que cada ponto corresponde a dois estados com spins opostos.
- O número total n de estados eletrônicos correspondentes a pontos no interior de um oitavo do volume da esfera é o dobro, logo:

$$n = \frac{2}{8} \frac{4}{3} \pi n_{rs}^3 = \frac{1}{3} \pi n_{rs}^3$$

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{n_{rs}^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

$$n = \frac{(2m)^{3/2} L^3 E^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3}$$

Distribuição de Fermi-Dirac

- ▶ Precisaremos saber como os elétrons estão distribuídos entre os diversos estados quânticos em uma dada temperatura.

Distribuição de Fermi-Dirac

- ▶ Precisaremos saber como os elétrons estão distribuídos entre os diversos estados quânticos em uma dada temperatura.
- ▶ Da distribuição de Maxwell-Boltzmann, o número de partículas em um estado com energia E é proporcional a $N \sim e^{-E/k_b T}$, (Válido para partículas *distinguíveis*).

Distribuição de Fermi-Dirac

- ▶ Precisaremos saber como os elétrons estão distribuídos entre os diversos estados quânticos em uma dada temperatura.
- ▶ Da distribuição de Maxwell-Boltzmann, o número de partículas em um estado com energia E é proporcional a $N \sim e^{-E/k_b T}$, (*Válido para partículas distinguíveis*).
- ▶ Prevê que em $T = 0$ todas as partículas deverias estar no estado $n_x = n_y = n_z = 1$ e $m_s = \pm 1/2$.

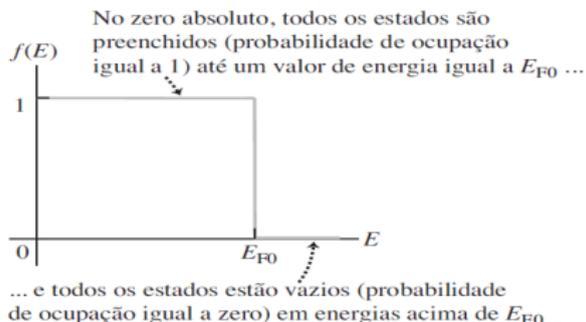
Distribuição de Fermi-Dirac

- ▶ Precisaremos saber como os elétrons estão distribuídos entre os diversos estados quânticos em uma dada temperatura.
- ▶ Da distribuição de Maxwell-Boltzmann, o número de partículas em um estado com energia E é proporcional a $N \sim e^{-E/k_b T}$, (**Válido para partículas distinguíveis**).
- ▶ Prevê que em $T = 0$ todas as partículas deverias estar no estado $n_x = n_y = n_z = 1$ e $m_s = \pm 1/2$.
- ▶ A distribuição estatística que emerge do princípio da exclusão e do conceito de **estados indistinguíveis** é a **distribuição de Fermi-Dirac**.

Distribuição de Fermi-Dirac

- ▶ A distribuição estatística que emerge do princípio da exclusão e do conceito de **estados indistinguíveis** é a **distribuição de Fermi-Dirac**.
- ▶ A probabilidade de ocupação de um estado particular com energia E é dada $f(E)$, a fração de estados ocupados com essa energia:

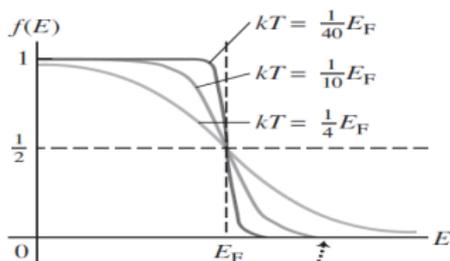
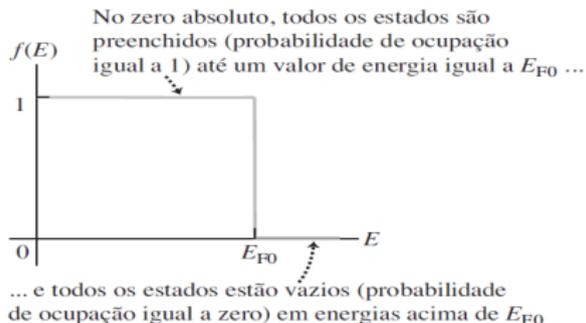
$$f(E) = \frac{1}{e^{(E-E_F)/k_b T} + 1}$$



Distribuição de Fermi-Dirac

- ▶ A distribuição estatística que emerge do princípio da exclusão e do conceito de **estados indistinguíveis** é a **distribuição de Fermi-Dirac**.
- ▶ A probabilidade de ocupação de um estado particular com energia E é dada $f(E)$, a fração de estados ocupados com essa energia:

$$f(E) = \frac{1}{e^{(E-E_F)/k_b T} + 1}$$



À medida que T aumenta, cresce o número de elétrons excitados até estados com energia $E > E_F$

Concentração de elétrons e energia de Fermi

- ▶ O número efetivo de elétrons em qualquer intervalo de energia dE , é obtido pelo produto $f(E)$ pelo número dn de estados no intervalo $g(E)dE$.

$$dN = g(E)f(E)dE$$

Concentração de elétrons e energia de Fermi

- ▶ O número efetivo de elétrons em qualquer intervalo de energia dE , é obtido pelo produto $f(E)$ pelo número dn de estados no intervalo $g(E)dE$.

$$dN = g(E)f(E)dE$$

$$dN = \frac{(2m)^{3/2}V}{2\pi^2\hbar^3} \frac{E^{1/2}}{e^{(E-E_F)/k_bT} + 1} dE$$

Concentração de elétrons e energia de Fermi

- ▶ O número efetivo de elétrons em qualquer intervalo de energia dE , é obtido pelo produto $f(E)$ pelo número dn de estados no intervalo $g(E)dE$.

$$dN = g(E)f(E)dE$$

$$dN = \frac{(2m)^{3/2}V}{2\pi^2\hbar^3} \frac{E^{1/2}}{e^{(E-E_F)/k_bT} + 1} dE$$

- ▶ A energia de Fermi E_F é determinada pelo número total N de elétrons.

Concentração de elétrons e energia de Fermi

- ▶ O número efetivo de elétrons em qualquer intervalo de energia dE , é obtido pelo produto $f(E)$ pelo número dn de estados no intervalo $g(E)dE$.

$$dN = g(E)f(E)dE$$

$$dN = \frac{(2m)^{3/2}V}{2\pi^2\hbar^3} \frac{E^{1/2}}{e^{(E-E_F)/k_bT} + 1} dE$$

- ▶ A energia de Fermi E_F é determinada pelo número total N de elétrons.
- ▶ Em qualquer T , os estados eletrônicos estão ocupados até um ponto em que todos os elétrons estão acomodados.

Modelo do Elétron Livre para um Metal

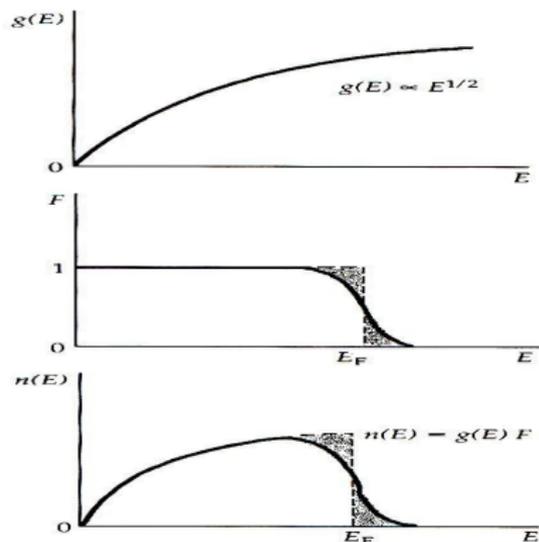
Concentração de elétrons e energia de Fermi

- O número efetivo de elétrons em qualquer intervalo de energia dE , é obtido pelo produto $f(E)$ pelo número dn de estados no intervalo $g(E)dE$.

$$dN = g(E)f(E)dE$$

$$dN = \frac{(2m)^{3/2}V}{2\pi^2\hbar^3} \frac{E^{1/2}}{e^{(E-E_F)/k_bT} + 1} dE$$

- A energia de Fermi E_F é determinada pelo número total N de elétrons.
- Em qualquer T , os estados eletrônicos estão ocupados até um ponto em que todos os elétrons estão acomodados.
- Em $T = 0$, todos os estados abaixo de E_F estão ocupados.



Modelo do Elétron Livre para um Metal

Concentração de elétrons e energia de Fermi

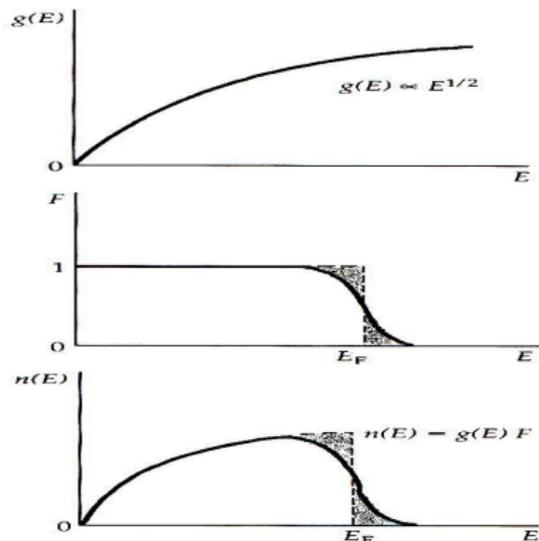
- O número efetivo de elétrons em qualquer intervalo de energia dE , é obtido pelo produto $f(E)$ pelo número dn de estados no intervalo $g(E)dE$.

$$dN = g(E)f(E)dE$$

$$dN = \frac{(2m)^{3/2}V}{2\pi^2\hbar^3} \frac{E^{1/2}}{e^{(E-E_F)/k_bT} + 1} dE$$

- A energia de Fermi E_F é determinada pelo número total N de elétrons.
- Em qualquer T , os estados eletrônicos estão ocupados até um ponto em que todos os elétrons estão acomodados.
- Em $T = 0$, todos os estados abaixo de E_F estão ocupados.
- Fazendo $n = N$ e $E = E_F$ obtemos:

$$n = N = \frac{(2m)^{3/2}VE_F^{3/2}}{3\pi^2\hbar^3}$$



Concentração de elétrons e energia de Fermi

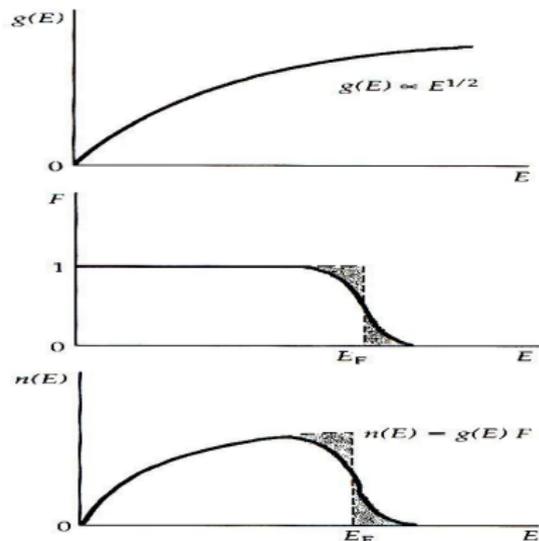
- ▶ O número efetivo de elétrons em qualquer intervalo de energia dE , é obtido pelo produto $f(E)$ pelo número dn de estados no intervalo $g(E)dE$.

$$dN = g(E)f(E)dE$$

$$dN = \frac{(2m)^{3/2}V}{2\pi^2\hbar^3} \frac{E^{1/2}}{e^{(E-E_F)/k_bT} + 1} dE$$

- ▶ A energia de Fermi E_F é determinada pelo número total N de elétrons.
- ▶ Em qualquer T , os estados eletrônicos estão ocupados até um ponto em que todos os elétrons estão acomodados.
- ▶ Em $T = 0$, todos os estados abaixo de E_F estão ocupados.
- ▶ Fazendo $n = N$ e $E = E_F$ obtemos:

$$n = N = \frac{(2m)^{3/2}VE_F^{3/2}}{3\pi^2\hbar^3}$$



$$E_F = \frac{(3)^{2/3}\pi^{4/3}\hbar^2}{2m} \left(\frac{N}{V}\right)^{2/3}$$

└ Modelo do Elétron Livre para um Metal

Concentração de elétrons e energia de Fermi

- ▶ O número efetivo de elétrons em qualquer intervalo de energia dE , é obtido pelo produto $f(E)$ pelo número dn de estados no intervalo $g(E)dE$.

$$E_F = \frac{(3)^{2/3} \pi^{4/3} \hbar^2}{2m} \left(\frac{N}{V} \right)^{2/3}$$

$$dN = g(E)f(E)dE$$

$$dN = \frac{(2m)^{3/2} V}{2\pi^2 \hbar^3} \frac{E^{1/2}}{e^{(E-E_F)/k_b T} + 1} dE$$

- ▶ A energia de Fermi E_F é determinada pelo número total N de elétrons.
- ▶ Em qualquer T , os estados eletrônicos estão ocupados até um ponto em que todos os elétrons estão acomodados.
- ▶ Em $T = 0$, todos os estados abaixo de E_F estão ocupados.
- ▶ Fazendo $n = N$ e $E = E_F$ obtemos:

$$n = N = \frac{(2m)^{3/2} V E_F^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3}$$

Símbolo (ELEMENTO)	N/V (elétrons por cm ³)	E _F (eV)
Al alumínio	18,1 x 10 ²²	11,7
Ag prata Exemplo	5,86 x 10 ²²	5,5
Au ouro	5,90 x 10 ²²	5,53
Cu cobre	8,47 x 10 ²²	7,04
Fe ferro	17,0 x 10 ²²	11,2
K potássio	1,4 x 10 ²²	2,11
Li lítio	4,7 x 10 ²²	4,75
Mg magnésio	8,6 x 10 ²²	7,11
Mn manganês	16,5 x 10 ²²	11,0
Na sódio	2,65 x 10 ²²	3,24
Sn estanho	14,8 x 10 ²²	10,2
Zn zinco	13,2 x 10 ²²	9,46

Concentração de elétrons e energia de Fermi

- ▶ O número efetivo de elétrons em qualquer intervalo de energia dE , é obtido pelo produto $f(E)$ pelo número dn de estados no intervalo $g(E)dE$.

$$dN = g(E)f(E)dE$$

$$dN = \frac{(2m)^{3/2}V}{2\pi^2\hbar^3} \frac{E^{1/2}}{e^{(E-E_F)/k_bT} + 1} dE$$

- ▶ A energia de Fermi E_F é determinada pelo número total N de elétrons.
- ▶ Em qualquer T , os estados eletrônicos estão ocupados até um ponto em que todos os elétrons estão acomodados.
- ▶ Em $T = 0$, todos os estados abaixo de E_F estão ocupados.
- ▶ Fazendo $n = N$ e $E = E_F$ obtemos:

$$n = N = \frac{(2m)^{3/2}VE_F^{3/2}}{3\pi^2\hbar^3}$$

$$E_F = \frac{(3)^{2/3}\pi^{4/3}\hbar^2}{2m} \left(\frac{N}{V}\right)^{2/3}$$

$$\left(\frac{N}{V}\right) = N_{ele-lig} \frac{\rho N_a}{M}$$

└ Modelo do Elétron Livre para um Metal

Concentração de elétrons e energia de Fermi

- ▶ O número efetivo de elétrons em qualquer intervalo de energia dE , é obtido pelo produto $f(E)$ pelo número dn de estados no intervalo $g(E)dE$.

$$dN = g(E)f(E)dE$$

$$dN = \frac{(2m)^{3/2}V}{2\pi^2\hbar^3} \frac{E^{1/2}}{e^{(E-E_F)/k_bT} + 1} dE$$

- ▶ A energia de Fermi E_F é determinada pelo número total N de elétrons.
- ▶ Em qualquer T , os estados eletrônicos estão ocupados até um ponto em que todos os elétrons estão acomodados.
- ▶ Em $T = 0$, todos os estados abaixo de E_F estão ocupados.
- ▶ Fazendo $n = N$ e $E = E_F$ obtemos:

$$n = N = \frac{(2m)^{3/2}VE_F^{3/2}}{3\pi^2\hbar^3}$$

$$E_F = \frac{(3)^{2/3}\pi^{4/3}\hbar^2}{2m} \left(\frac{N}{V}\right)^{2/3}$$

$$\left(\frac{N}{V}\right) = N_{ele-lig} \frac{\rho N_a}{M}$$

- ▶ Alumínio: Densidade atômica, $\rho_{Al} = 2.697 \text{ g/cm}^3$,
 $N_a = 6.022 \times 10^{23} \text{ atoms/mol}$
- ▶ Massa molecular, $M_{Al} = 26.98 \text{ g/mol}$ e Configuração eletrônica: $[\text{Ne}] 3s^2 3p^1 \rightarrow N_{ele-lig} = 3$

└ Modelo do Elétron Livre para um Metal

Concentração de elétrons e energia de Fermi

- ▶ O número efetivo de elétrons em qualquer intervalo de energia dE , é obtido pelo produto $f(E)$ pelo número dn de estados no intervalo $g(E)dE$.

$$dN = g(E)f(E)dE$$

$$dN = \frac{(2m)^{3/2}V}{2\pi^2\hbar^3} \frac{E^{1/2}}{e^{(E-E_F)/k_bT} + 1} dE$$

- ▶ A energia de Fermi E_F é determinada pelo número total N de elétrons.
- ▶ Em qualquer T , os estados eletrônicos estão ocupados até um ponto em que todos os elétrons estão acomodados.
- ▶ Em $T = 0$, todos os estados abaixo de E_F estão ocupados.
- ▶ Fazendo $n = N$ e $E = E_F$ obtemos:

$$n = N = \frac{(2m)^{3/2}VE_F^{3/2}}{3\pi^2\hbar^3}$$

$$E_F = \frac{(3)^{2/3}\pi^{4/3}\hbar^2}{2m} \left(\frac{N}{V}\right)^{2/3}$$

$$\left(\frac{N}{V}\right) = N_{ele-lig} \frac{\rho N_a}{M}$$

- ▶ Alumínio: Densidade atômica, $\rho_{Al} = 2.697 \text{ g/cm}^3$,
 $N_a = 6.022 \times 10^{23} \text{ atoms/mol}$
- ▶ Massa molecular, $M_{Al} = 26.98 \text{ g/mol}$ e
Configuração eletrônica: $[\text{Ne}] 3s^2 3p^1 \rightarrow$
 $N_{ele-lig} = 3$

$$\frac{N}{V} = 3 \frac{2.697 \text{ g}}{\text{cm}^3} \frac{6.022 \times 10^{23} \text{ atoms}}{\text{mol}} \frac{\text{mol}}{26.98 \text{ g}}$$

$$\frac{N}{V} = 18.019 \times 10^{22} \frac{\text{eletrons}}{\text{cm}^3}$$

Energia média de um elétron livre

- ▶ A energia média de um elétron livre em um metal no zero absoluto, $T = 0$, será dada por:

$$E_{Tot} = \int_0^{\infty} E dN = \int_0^{\infty} E g(E) f(E) dE$$

Energia media de um elétron livre

- ▶ A energia media de um elétron livre em um metal no zero absoluto, $T = 0$, sera dada por:

$$E_{Tot} = \int_0^{\infty} E dN = \int_0^{\infty} E g(E) f(E) dE$$

$$E_{Tot} = \int_0^{E_F} E g(E) (1) dE + \int_{E_F}^{\infty} E g(E) (0) dE$$

Energia média de um elétron livre

- A energia média de um elétron livre em um metal no zero absoluto, $T = 0$, será dada por:

$$E_{Tot} = \int_0^{\infty} E dN = \int_0^{\infty} E g(E) f(E) dE$$

$$E_{Tot} = \int_0^{E_F} E g(E) (1) dE + \int_{E_F}^{\infty} E g(E) (0) dE$$

$$E_{Tot} = \int_0^{E_F} E g(E) dE = \int_0^{E_F} E \frac{3}{2} \frac{N E^{1/2}}{E_F^{3/2}} dE$$

Energia media de um elétron livre

- A energia media de um elétron livre em um metal no zero absoluto, $T = 0$, sera dada por:

$$E_{Tot} = \int_0^{\infty} E dN = \int_0^{\infty} E g(E) f(E) dE$$

$$E_{Tot} = \int_0^{E_F} E g(E) (1) dE + \int_{E_F}^{\infty} E g(E) (0) dE$$

$$E_{Tot} = \int_0^{E_F} E g(E) dE = \int_0^{E_F} E \frac{3}{2} \frac{NE^{1/2}}{E_F^{3/2}} dE$$

$$E_{Med} = E_{Tot}/N = \frac{3}{5} E_F$$

└ Semicondutores

- ▶ Um **semicondutor** possui uma resistividade elétrica intermediária entre a de um bom condutor e a de um bom isolante.

└ Semicondutores

- ▶ Um **semicondutor** possui uma resistividade elétrica intermediária entre a de um bom condutor e a de um bom isolante.
- ▶ Suas propriedades elétricas são muito sensíveis a pequenas variações de impurezas.

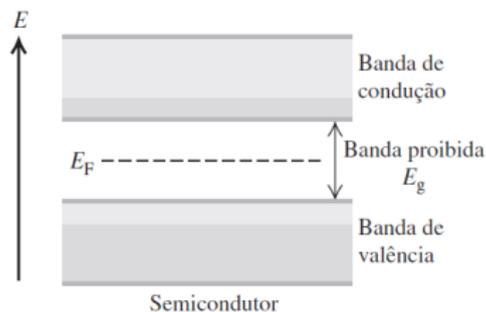
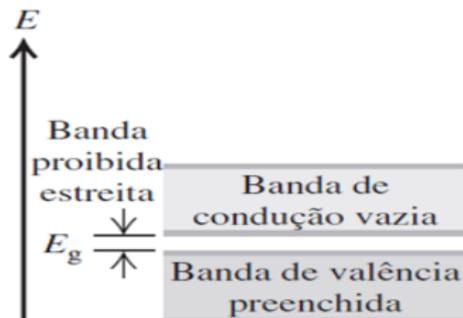
└ Semicondutores

- ▶ Um **semicondutor** possui uma resistividade elétrica intermediária entre a de um bom condutor e a de um bom isolante.
- ▶ Suas propriedades elétricas são muito sensíveis a pequenas variações de impurezas.
- ▶ Ex.: Silício (Si) ($3s^2 3p^2$), $E_g = 0.67\text{eV}$.
- ▶ Ex.: Germânio (Ge) ($4s^2 4p^2$), $E_g = 1.12\text{eV}$.

- ▶ Um **semicondutor** possui uma resistividade elétrica intermediária entre a de um bom condutor e a de um bom isolante.
- ▶ Suas propriedades elétricas são muito sensíveis a pequenas variações de impurezas.
- ▶ Ex.: Silício (Si) ($3s^23p^2$), $E_g = 0.67\text{eV}$.
- ▶ Ex.: Germânio (Ge) ($4s^24p^2$), $E_g = 1.12\text{eV}$.
- ▶ Ambos são cristais covalente com a estrutura do diamante.

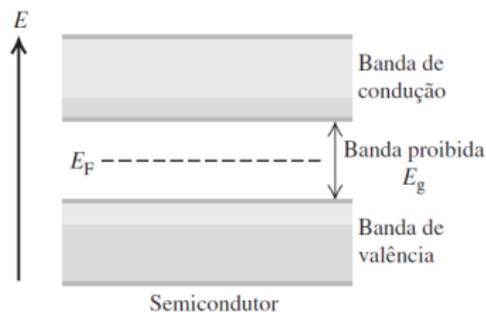
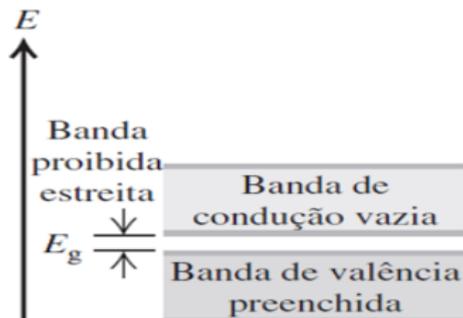
└ Semicondutores

- ▶ Um **semicondutor** possui uma resistividade elétrica intermediária entre a de um bom condutor e a de um bom isolante.
- ▶ Suas propriedades elétricas são muito sensíveis a pequenas variações de impurezas.
- ▶ Ex.: Silício (Si) ($3s^2 3p^2$), $E_g = 0.67\text{eV}$.
- ▶ Ex.: Germânio (Ge) ($4s^2 4p^2$), $E_g = 1.12\text{eV}$.
- ▶ Ambos são cristais covalente com a estrutura do diamante.
- ▶ Em $T = 0$ a banda de valência é completamente cheia, separada por uma banda proibida, da banda de condução vazia.
- ▶ Em $T \neq 0$ um número considerável de elétrons podem pular a banda proibida e atingir a banda de condução, onde podem mover-se livremente no cristal.



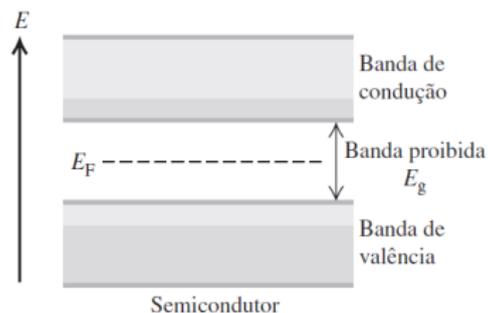
└ Semicondutores

- ▶ Um **semicondutor** possui uma resistividade elétrica intermediária entre a de um bom condutor e a de um bom isolante.
- ▶ Suas propriedades elétricas são muito sensíveis a pequenas variações de impurezas.
- ▶ Ex.: Silício (Si) ($3s^2 3p^2$), $E_g = 0.67\text{eV}$.
- ▶ Ex.: Germânio (Ge) ($4s^2 4p^2$), $E_g = 1.12\text{eV}$.
- ▶ Ambos são cristais covalente com a estrutura do diamante.
- ▶ Em $T = 0$ a banda de valência é completamente cheia, separada por uma banda proibida, da banda de condução vazia.
- ▶ Em $T \neq 0$ um número considerável de elétrons podem pular a banda proibida e atingir a banda de condução, onde podem mover-se livremente no cristal.
- ▶ O número de elétrons cresce rapidamente com a temperatura.



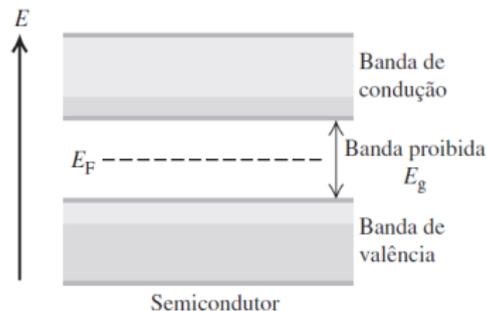
Buracos

- ▶ Ao ser removido de uma ligação covalente, um elétron deixa uma vacância em seu lugar.



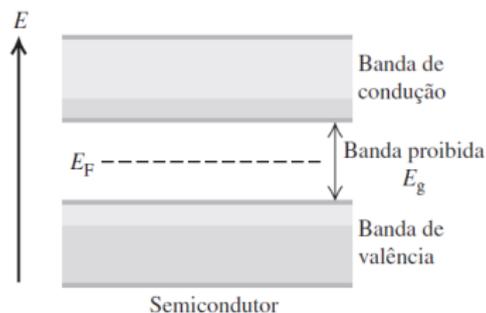
Buracos

- ▶ Ao ser removido de uma ligação covalente, um elétron deixa uma vacância em seu lugar.
- ▶ A vacância é chamada de **buraco**.



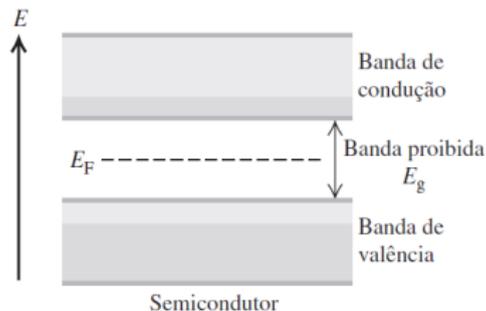
Buracos

- ▶ Ao ser removido de uma ligação covalente, um elétron deixa uma vacância em seu lugar.
- ▶ A vacância é chamada de **buraco**.
- ▶ O buraco pode deslocar-se no cristal comportando-se como outro portador de carga adicional da corrente elétrica.



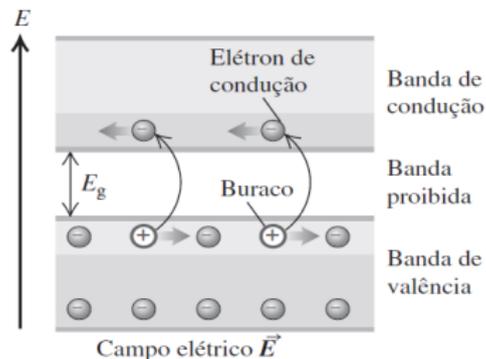
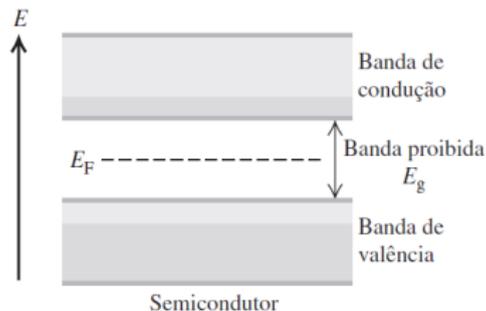
Buracos

- ▶ Ao ser removido de uma ligação covalente, um elétron deixa uma vacância em seu lugar.
- ▶ A vacância é chamada de **buraco**.
- ▶ O buraco pode deslocar-se no cristal comportando-se como outro portador de carga adicional da corrente elétrica.
- ▶ Um semiconductor puro, chamado de **intrínseco**, o número buracos é igual ao numero de elétrons na banda de condução.



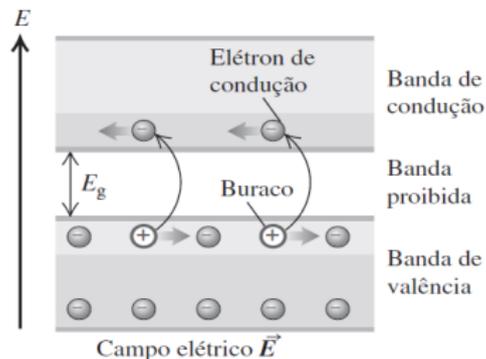
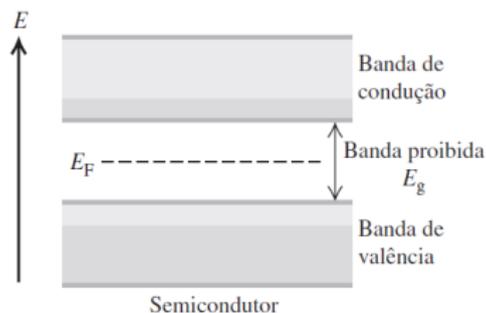
Buracos

- ▶ Ao ser removido de uma ligação covalente, um elétron deixa uma vacância em seu lugar.
- ▶ A vacância é chamada de **buraco**.
- ▶ O buraco pode deslocar-se no cristal comportando-se como outro portador de carga adicional da corrente elétrica.
- ▶ Um semiconductor puro, chamado de **intrínseco**, o número buracos é igual ao numero de elétrons na banda de condução.
- ▶ Quando $\vec{E} \neq 0$, esses portadores se movem em sentidos contrários.



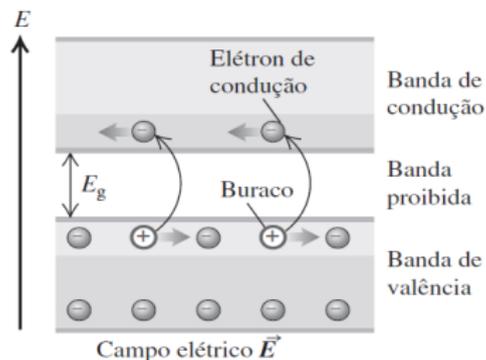
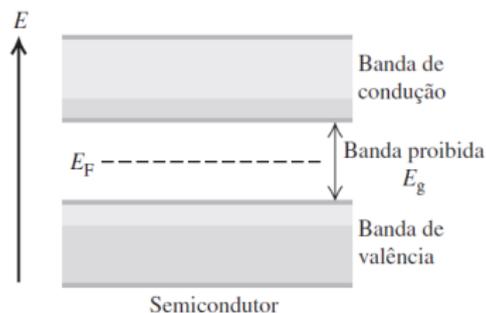
Buracos

- ▶ Ao ser removido de uma ligação covalente, um elétron deixa uma vacância em seu lugar.
- ▶ A vacância é chamada de **buraco**.
- ▶ O buraco pode deslocar-se no cristal comportando-se como outro portador de carga adicional da corrente elétrica.
- ▶ Um semiconductor puro, chamado de **intrínseco**, o número buracos é igual ao número de elétrons na banda de condução.
- ▶ Quando $\vec{E} \neq 0$, esses portadores se movem em sentidos contrários.
- ▶ Um buraco na banda de valência se comporta como uma carga positiva, embora as cargas que se deslocam na banda sejam elétrons.



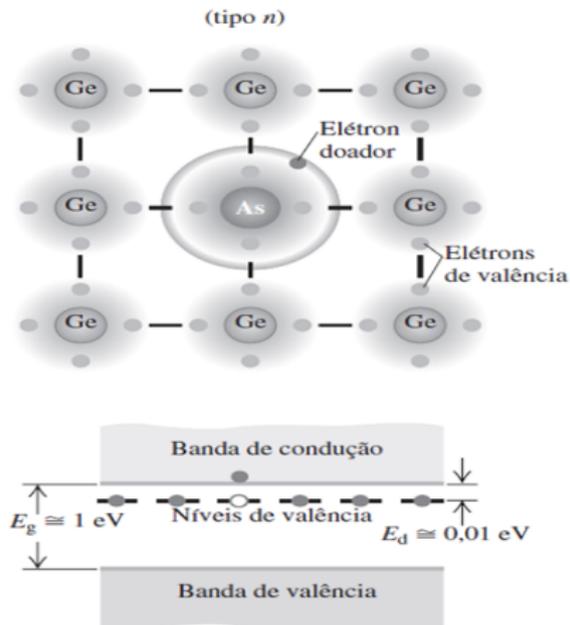
Buracos

- ▶ Ao ser removido de uma ligação covalente, um elétron deixa uma vacância em seu lugar.
- ▶ A vacância é chamada de **buraco**.
- ▶ O buraco pode deslocar-se no cristal comportando-se como outro portador de carga adicional da corrente elétrica.
- ▶ Um semiconductor puro, chamado de **intrínseco**, o número buracos é igual ao numero de elétrons na banda de condução.
- ▶ Quando $\vec{E} \neq 0$, esses portadores se movem em sentidos contrários.
- ▶ Um buraco na banda de valência se comporta como uma carga positiva, embora as cargas que se deslocam na banda sejam elétrons.
- ▶ O tipo de condutividade que acabamos de descrever para um semiconductor denomina-se condutividade intrínseca.



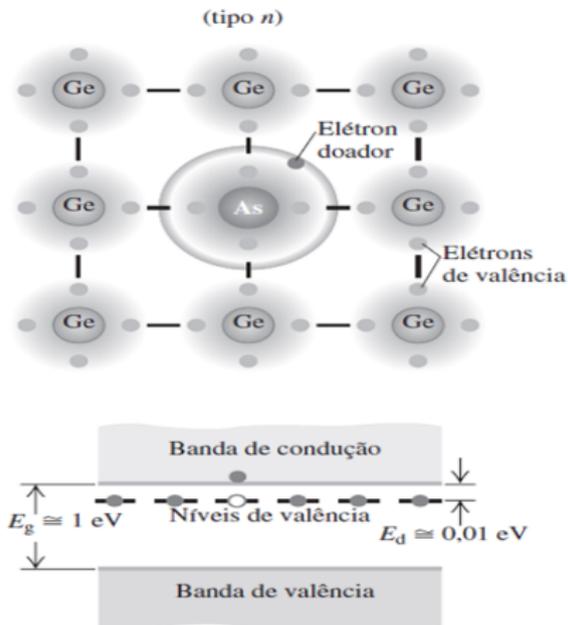
Impurezas tipo n

- ▶ A adição de impurezas de outros elementos é chamada de dopagem.



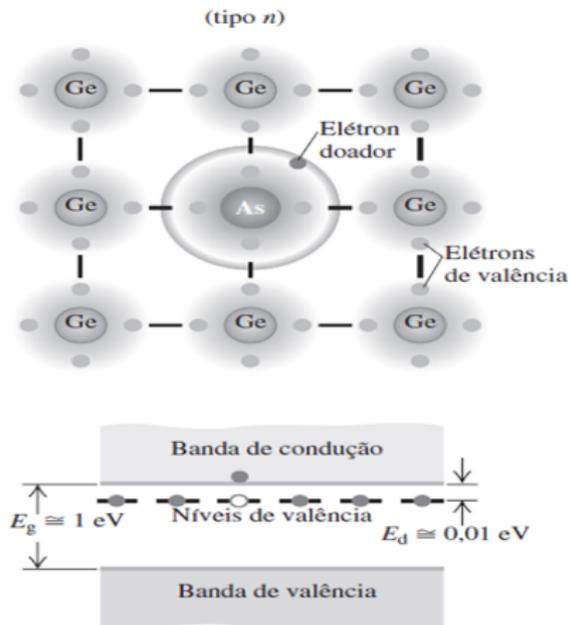
Impurezas tipo n

- ▶ A adição de impurezas de outros elementos é chamada de dopagem.
- ▶ Quando a impureza doa um elétron ao semiconductor chamamos de tipo n .



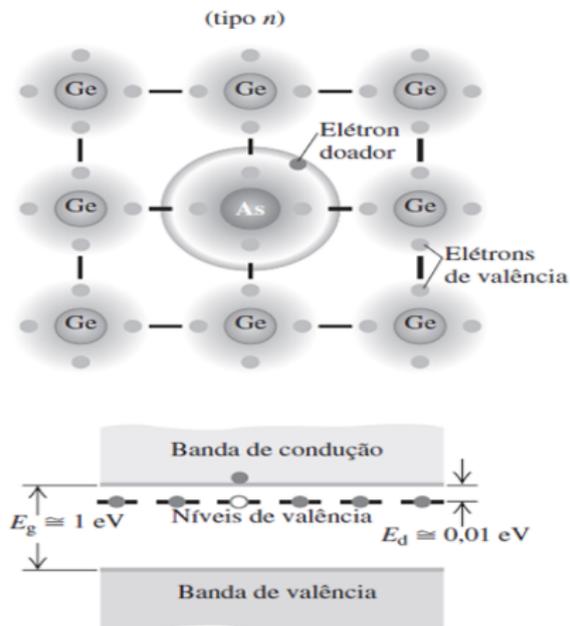
Impurezas tipo n

- ▶ A adição de impurezas de outros elementos é chamada de dopagem.
- ▶ Quando a impureza doa um elétron ao semiconductor chamamos de tipo n .
- ▶ O nível de energia desse quinto elétron extra na descrição das bandas de energia corresponde a um nível isolado no interior da banda proibida, situada a $0,01\text{eV}$ abaixo do limite inferior da banda de condução.



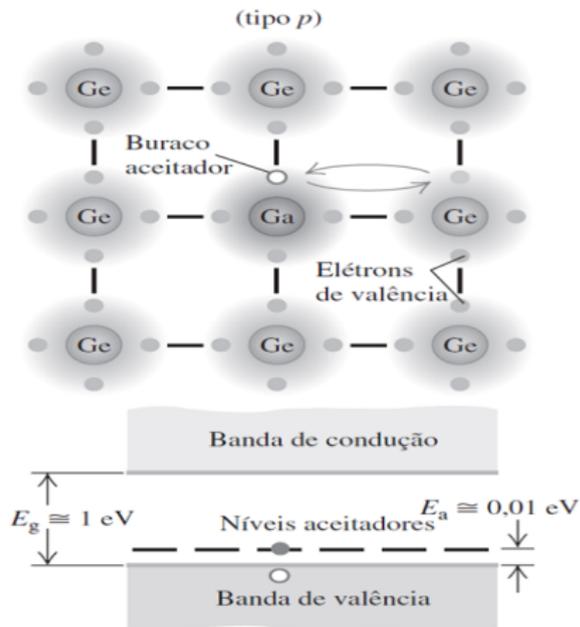
Impurezas tipo n

- ▶ A adição de impurezas de outros elementos é chamada de dopagem.
- ▶ Quando a impureza doa um elétron ao semiconductor chamamos de tipo n .
- ▶ O nível de energia desse quinto elétron extra na descrição das bandas de energia corresponde a um nível isolado no interior da banda proibida, situada a $0,01\text{eV}$ abaixo do limite inferior da banda de condução.
- ▶ Esse nível é chamado de **nível doador** e o átomo de impureza doadora.



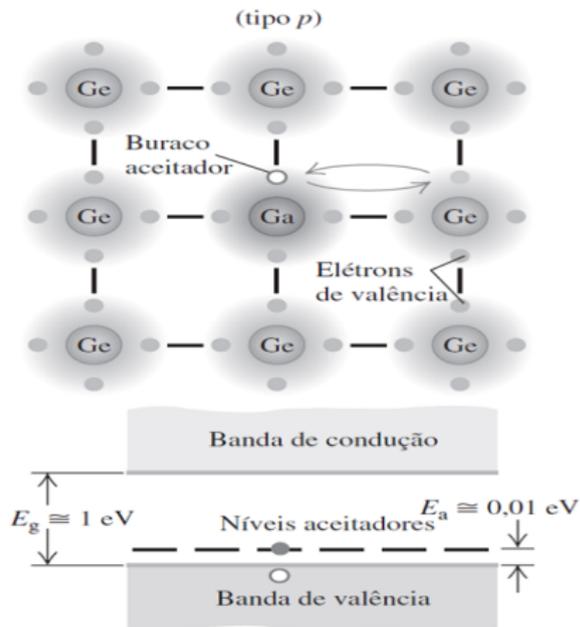
Impurezas tipo p

- ▶ Quando a impureza rouba um elétron ao semiconductor chamamos de tipo p .



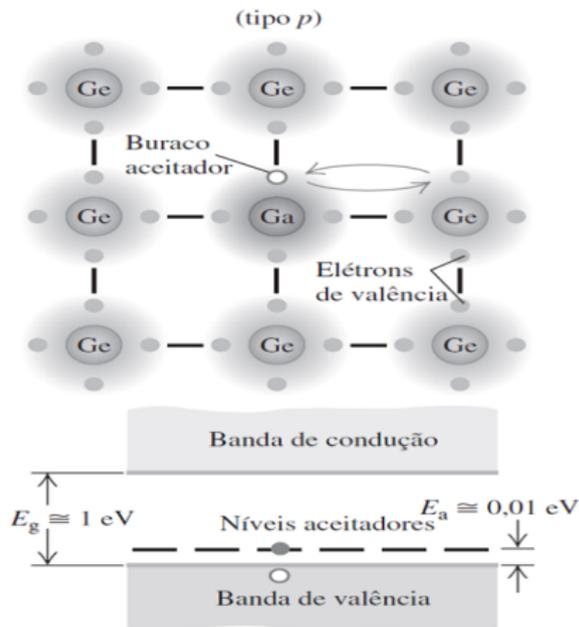
Impurezas tipo p

- Quando a impureza rouba um elétron ao semiconductor chamamos de tipo p .



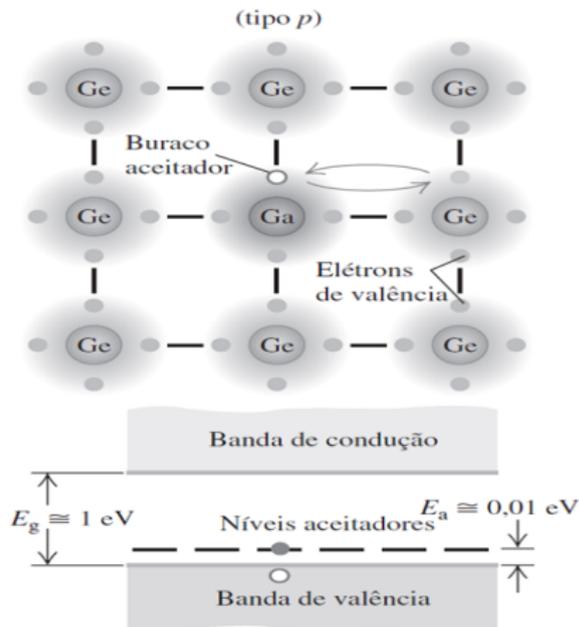
Impurezas tipo p

- ▶ Quando a impureza rouba um elétron ao semiconductor chamamos de tipo p .
- ▶ O nível de energia desse quinto elétron extra na descrição das bandas de energia corresponde a um nível isolado no interior da banda proibida, situada a $0,01\text{eV}$ acima do limite inferior da banda de valência.



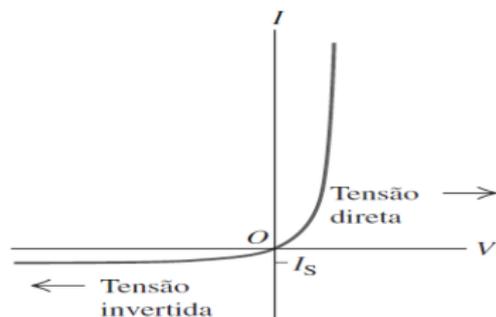
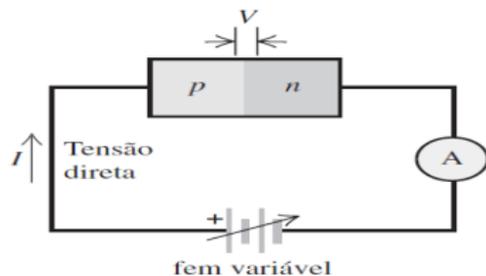
Impurezas tipo p

- ▶ Quando a impureza rouba um elétron ao semiconductor chamamos de tipo p .
- ▶ O nível de energia desse quinto elétron extra na descrição das bandas de energia corresponde a um nível isolado no interior da banda proibida, situada a $0,01\text{eV}$ acima do limite inferior da banda de valência.
- ▶ Esse nível é chamado de **nível aceitador** e o átomo de impureza doadora.



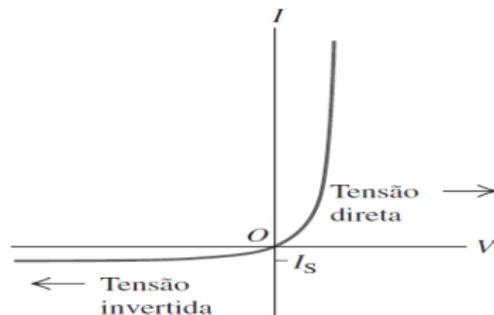
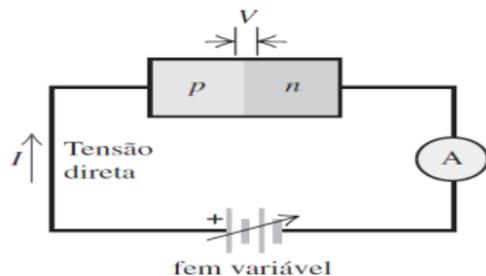
A junção p-n

- ▶ A junção $p - n$ que se forma na fronteira entre um semiconductor do tipo n e tipo p .



A junção p-n

- ▶ A junção $p - n$ que se forma na fronteira entre um semiconductor do tipo n e tipo p .
- ▶ Um modo de fabricar uma junção $p - n$ consiste em depositar um material do tipo p sobre a superfície extremamente polida de um semiconductor do tipo n .

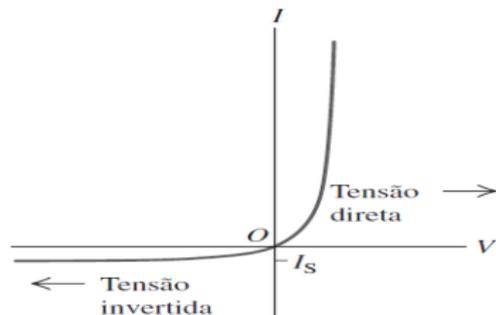
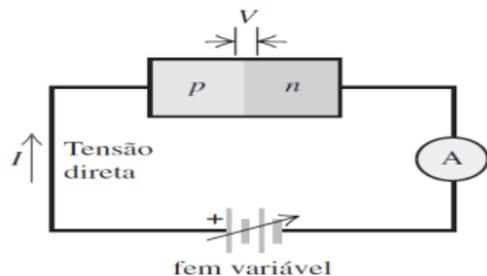


A junção p-n

- ▶ A junção $p - n$ que se forma na fronteira entre um semiconductor do tipo n e tipo p .
- ▶ Um modo de fabricar uma junção $p - n$ consiste em depositar um material do tipo p sobre a superfície extremamente polida de um semiconductor do tipo n .
- ▶ Quando uma junção $p - n$ é conectada a um circuito que existe uma diferença de potencial $V_p - V_n = V$ ao longo da junção, a corrente I varia como:

$$I = I_S(e^{eV/k_bT} - 1)$$

- ▶ Um dispositivo como este, de sentido único (praticamente) para a corrente, denomina-se **diodo retificador**.



Correntes através de uma junção p-n

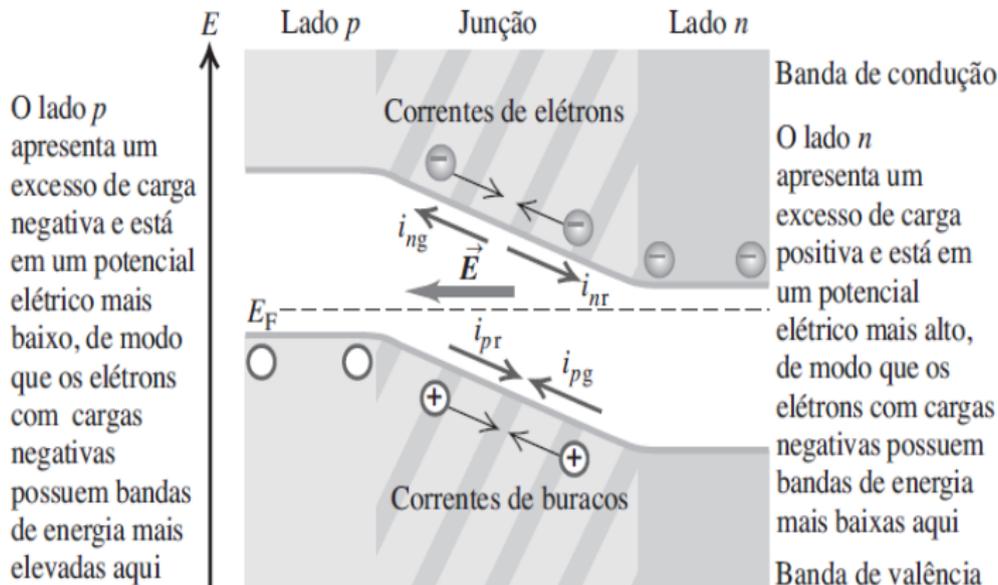
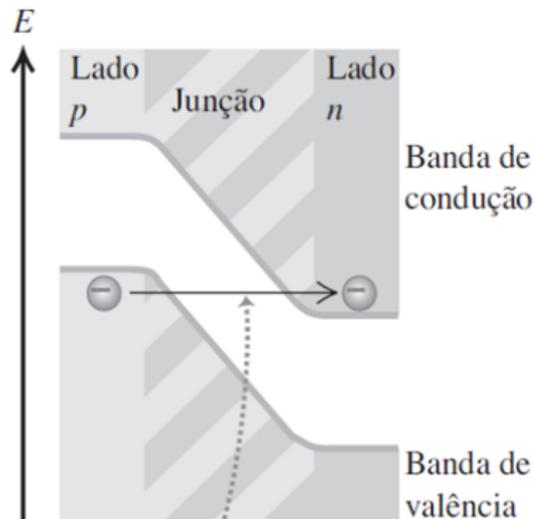


Figura 42.32 Uma junção p - n em equilíbrio, sem nenhum campo elétrico aplicado ou qualquer diferença de potencial. A corrente gerada se equilibra com a corrente de recombinação. O nível de Fermi E_F é o mesmo

Luz e dispositivos semicondutores



Quando a junção $p-n$ é suficientemente fina, os elétrons podem tunelar facilmente da banda de valência para a banda de condução; esse processo é chamado de avalanche Zener

Figura 42.34 Quando existe uma tensão invertida, a diferença de energia