

PROPRIEDADES ELÉCTRICAS

1. Ligação química e propriedades eléctricas
 - 1.1. Condutores e isolantes
 - 1.2. Semicondutores intrínsecos
 - 1.3. Semicondutores extrínsecos tipo n e p
 2. Teorias da Condução
 - 2.1. Modelo clássico de Drude e Lorentz
 - 2.2. Modelo quântico de Sommerfeld
 - 2.3. Teoria das Bandas de Bloch-Brillouin
 3. Densidade e mobilidade de portadores de carga
 - 3.1. Em metais (dependência da temperatura e impurezas)
 - 3.2. Em semicondutores intrínsecos (dependência da temperatura)
 - 3.3. Em semicondutores extrínsecos (dependência da temperatura)
 4. Exemplos e Aplicações
 - 4.1. Potencial de extracção e emissão termiónica
 - 4.2. Contacto metal-metal
 - 4.3. Junção P-N
-

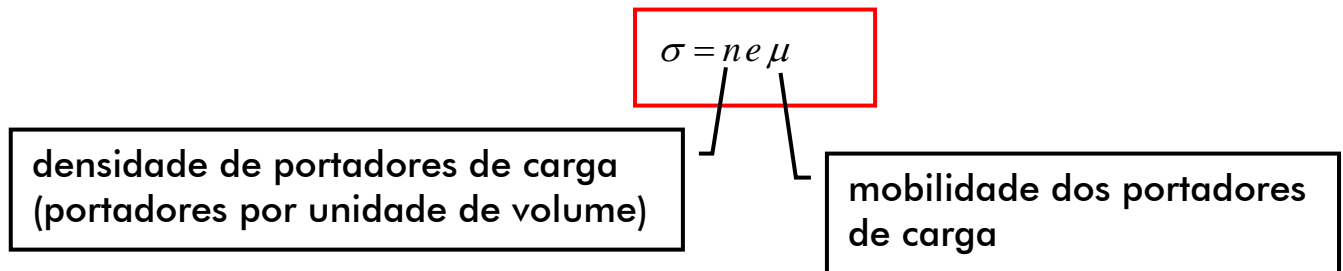
INTRODUÇÃO

Condução - Movimento orientado de cargas eléctricas por acção de um campo eléctrico.

Cargas eléctricas: *electrões* ou *iões*

$$\text{Condutividade} = \frac{1}{\text{Resistividade}} \quad \sigma = \frac{1}{\rho}$$

unidades de σ : Simmens/m (S/m ou $1/\Omega \text{ m}$)



Há portadores positivos e negativos

$$\sigma = n_e e \mu_e + n_p p \mu_p$$

Condutor	$\sigma > 10^{-2} \text{ S/m}$
Semicondutor	$10^{-2} \text{ S/m} > \sigma > 10^{-4} \text{ S/m}$
Isolante	$\sigma < 10^{-4} \text{ S/m}$

OBJECTIVOS

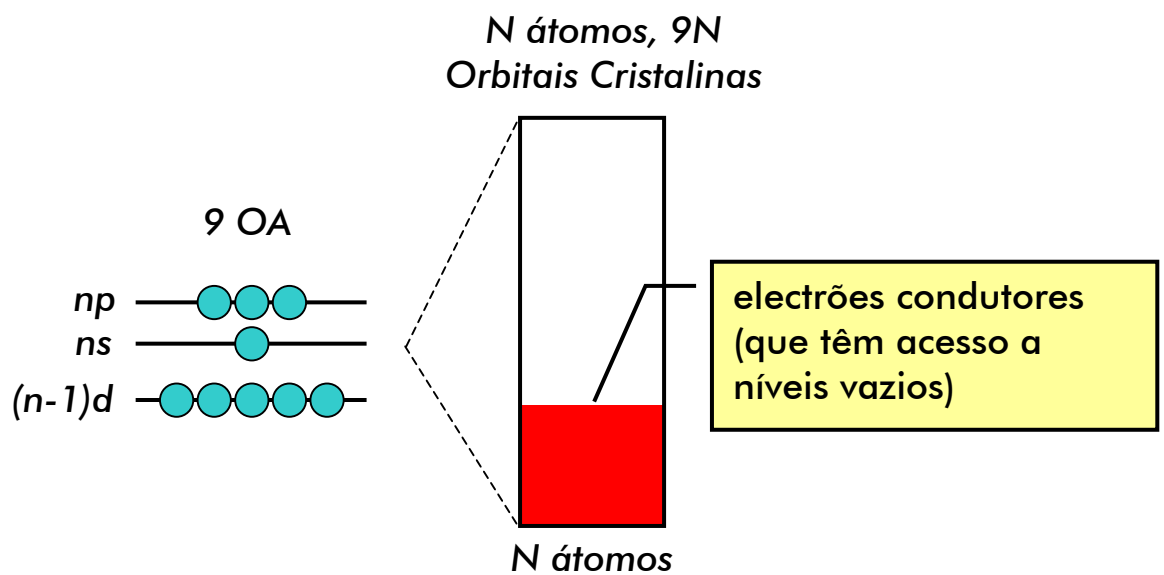
- Definir n e μ
- Estudar a variação de n e μ com a temperatura
- Efeito de impurezas nos condutores
- Fenómenos primários nos dispositivos electrónicos
 - emissão termiónica
 - junção metal-metal
 - junção semicondutor p-semicondutor n (junção p-n)

1. Ligação química e propriedades eléctricas

1.1. Condutores e isolantes

Bandas de Bloch em Condutores

The image shows a periodic table of elements. A red box highlights a large portion of the table, including the transition metals (groups 3-10), as well as groups 11-12, 13-16, and 17-18. The text "Metais condutores" is overlaid on the transition metal region.



Todos os electrões sentem o campo aplicado

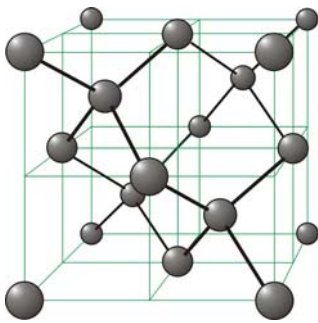
Um electrão só é condutor se puder adquirir mais energia.
Só os electrões com acesso a níveis próximos vazios podem ser acelerados (adquirir energia cinética).

1.2. Semicondutores Intrínsecos

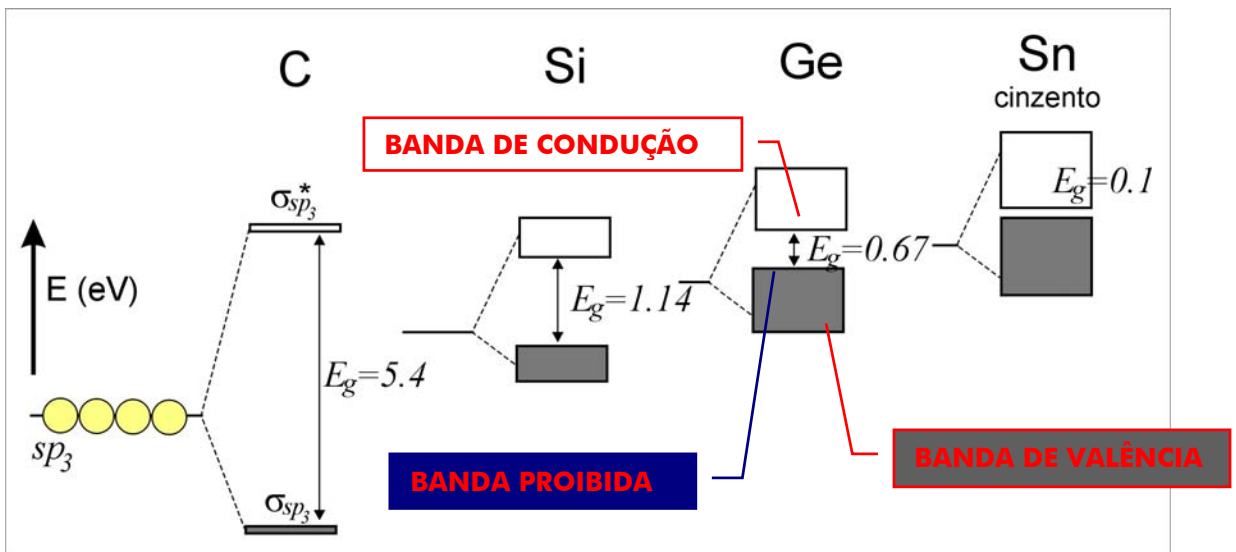
Bandas de Bloch em Semicondutores Intrínsecos

The periodic table shows elements grouped by their electrical properties. Semiconductors (Si, Ge, Sn, Pb) are highlighted in yellow, and insulators (B, C, N, O, Al, Ga, In, Tl) are highlighted in blue. Other elements are in white.

Estrutura cristalina dos semicondutores intrínsecos

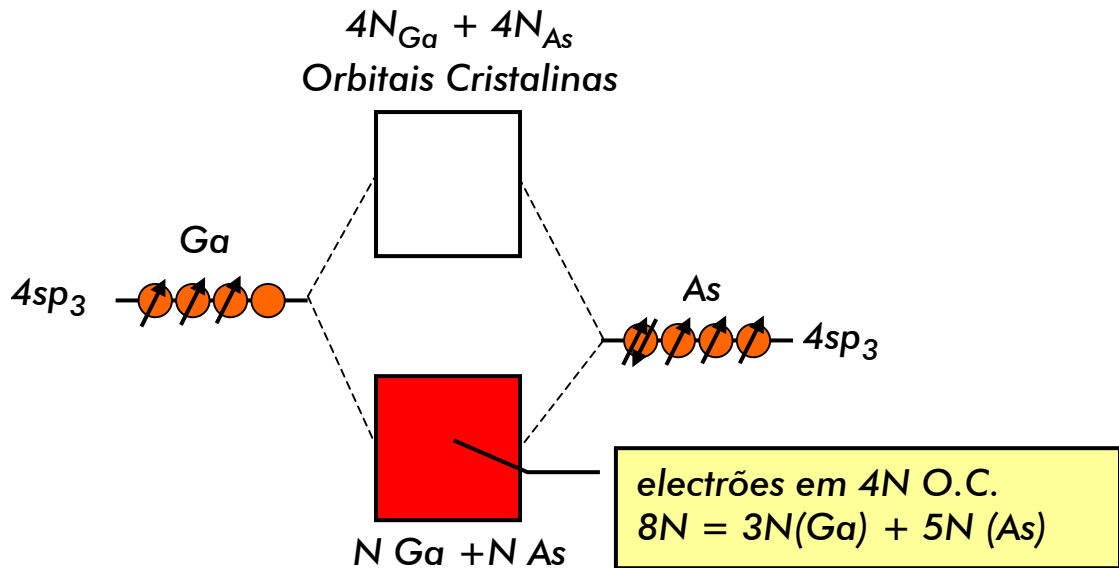


Evolução da energia da banda proibida



Semicondutores intrínsecos Grupo III + Grupo V

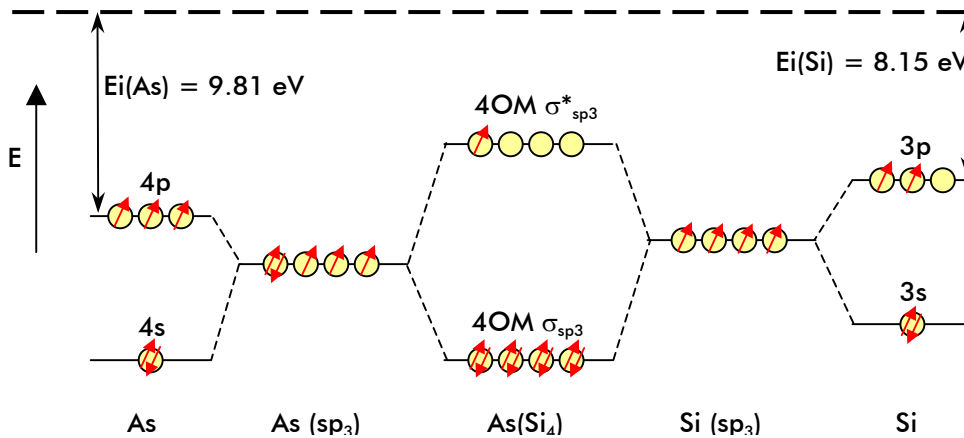
Ex: Arsenieto de gálio, AsGa



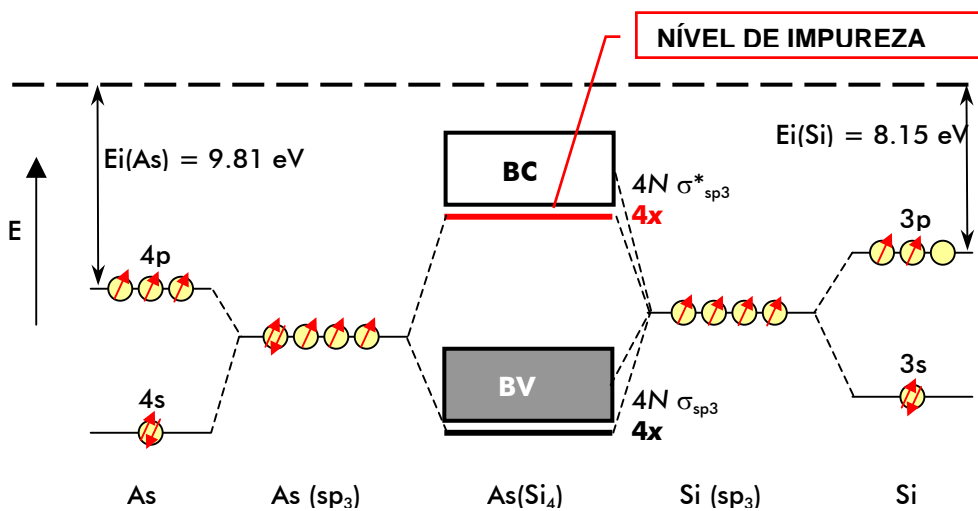
1.3. Semicondutores Extrínsecos

Semicondutores Extrínsecos tipo n Bandas de Bloch e Níveis de Impureza

Níveis de energia para 1 átomo de arsénio rodeado por 4 de silício



Número total de átomos $2N$ x átomos de arsénio



$$\text{n}^\circ \text{ de electrões} = 4(2N-x) + 5x$$

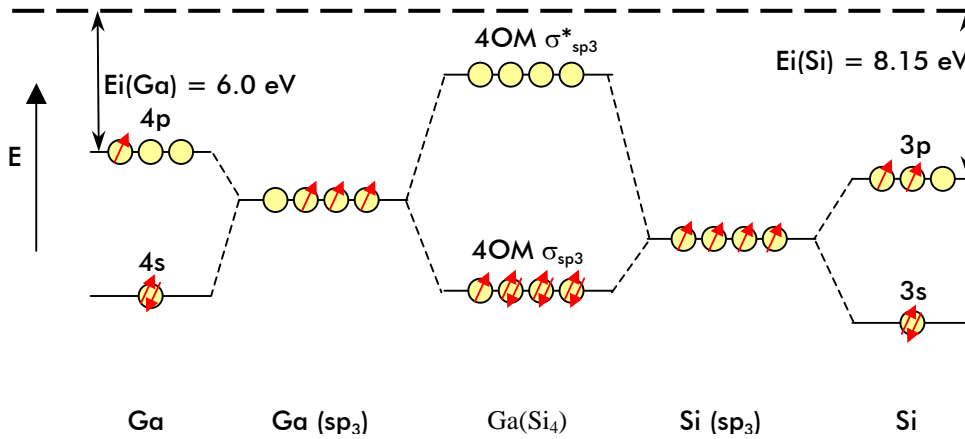
$$\text{n}^\circ \text{ de níveis ligantes} = 4N$$

sobram x electrões no nível de impureza para $4x$ orbitais antiligantes localizadas

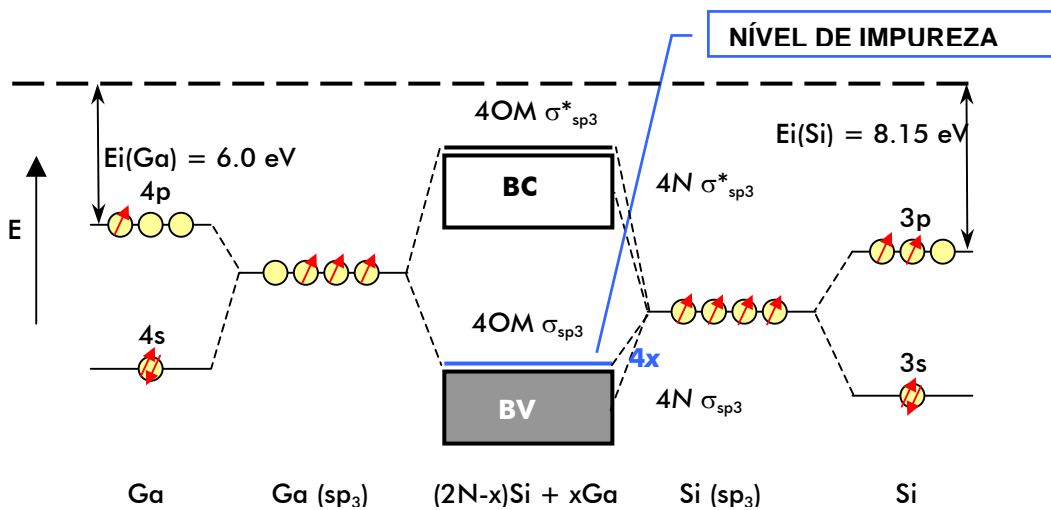
$$E_{id}(\text{AsSi}) = 0.049 \text{ eV (comparar com } k_B T = k_B 298 = 0.026 \text{ eV)}$$

Semicondutores Extrínsecos tipo p Bandas de Bloch e Níveis de Impureza

Níveis de energia para 1 átomo de gálio rodeado por 4 de silício



Número total de átomos $2N$ x átomos de gálio



n° de electrões = $4(2N-x) + 3x$
 n° de níveis ligantes = $4N$
 ficam x lacunas no nível de impureza
 $E_{ia}(\text{GaSi}) = 0.0127 \text{ eV}$

2. Teorias de condução em metais

2.1. Modelo clássico de Drude e Lorentz (1900)

2.2. Modelo quântico de Sommerfeld (1928)

2.3. Modelo das Zonas de Bloch-Brillouin

2.1. Modelo de Drude e Lorentz (1900)

1897 – Thompson descobre o electrão

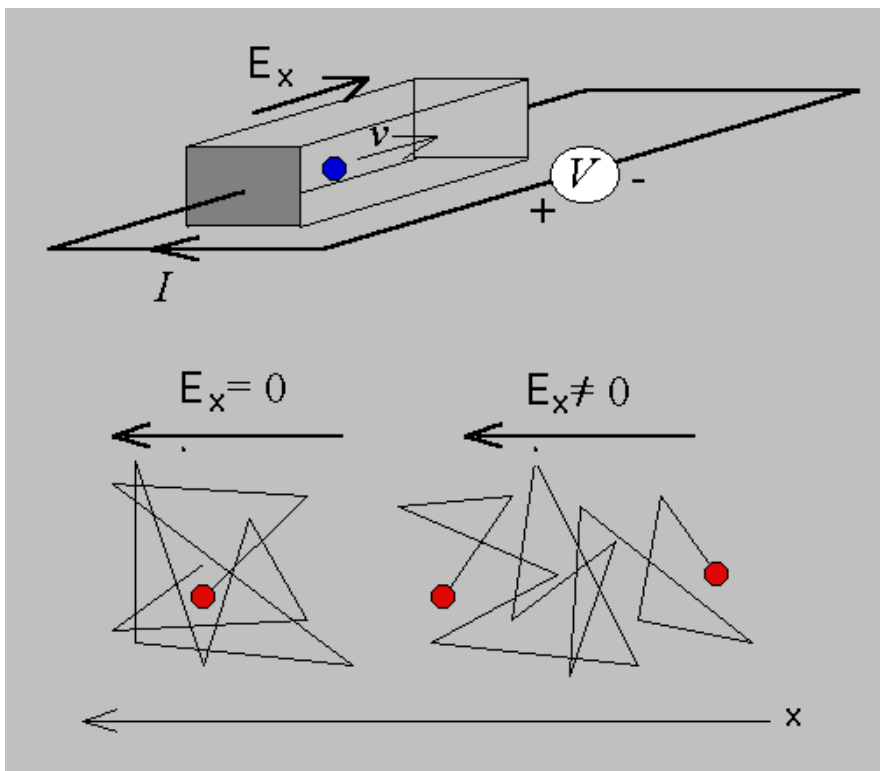
1860 – Maxwell & Boltzmann Teoria cinética dos gases (clássica)

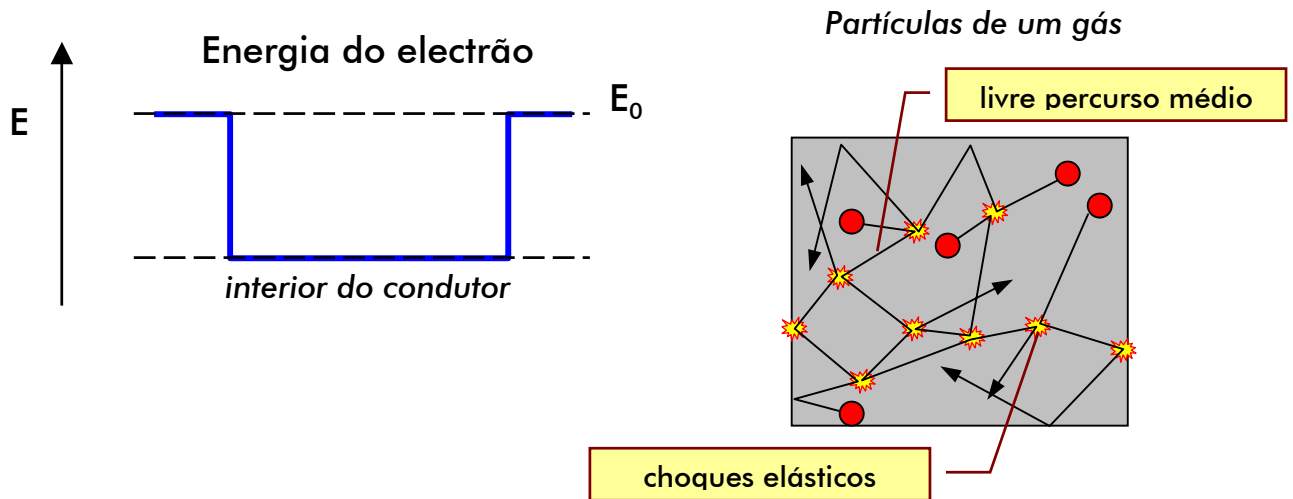
Ideia base de Drude: Espaço disponível para o electrão num metal.

Ex: $R(\text{Na}^+) = 0.098 \text{ nm}$

$R(\text{Na}) = 0.183 \text{ nm}$ 15% do espaço ocupado

- 1) Os electrões deslocam-se num metal como as moléculas num gás.
- 2) Chocam com os átomos da rede e com outros electrões.
- 3) Quando sujeitos a um campo eléctrico são acelerados na direcção do campo.



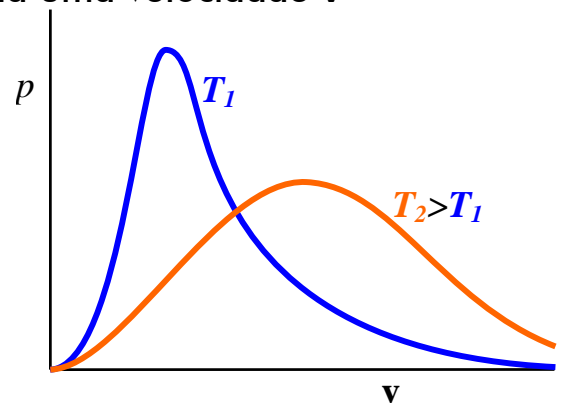


Teoria Cinética dos gases

Distribuição de velocidades (energias) de Maxwell-Boltzmann.

Probabilidade, p , que uma partícula tenha uma velocidade v

$$p = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} v^2 e^{-mv^2/2kT}$$



Velocidade média $\langle v \rangle$

e energia cinética média, ε

$$\langle v \rangle = \sqrt{\frac{2kT}{m}}, \quad \langle \varepsilon \rangle = \frac{3}{2} k_B T$$

Frequência de colisão, ν , tempo médio entre colisões, τ , e livre percurso médio, λ .

Condutividade $\sigma = ne\mu$

Número de portadores negativos n é o número de "electrões de valência" por unidade de volume.

Mobilidade na presença de um campo eléctrico μ é possível determinar.

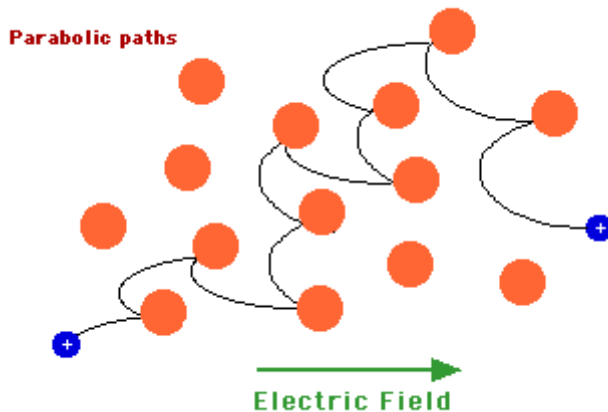
Mobilidade

Na ausência de campo aplicado os electrões deslocam-se aleatoriamente com velocidade média $\langle \mathbf{v}_a \rangle$

$$\frac{1}{2} m_e \langle v_a \rangle^2 = \frac{3}{2} k_B T, \quad \text{para } T = 298K \quad \langle v_a \rangle \approx 10^7 \text{ cm/s}$$

Na ausência de campo eléctrico a velocidade média segundo X é zero mas os electrões estão em movimento aleatório.

Aplicado um campo eléctrico, E, os electrões são acelerados pelo campo, mas a velocidade não pode ser sempre crescente. Se os portadores fossem livres, eram acelerados pelo campo. Logo σ aumentava com t (tempo de aplicação do campo)



“drift velocity”, \mathbf{v}_d , velocidade média na direcção do campo

Na presença de campo aplicado a componente da velocidade sofre um ligeiro aumento segundo o campo (lacunas) ou contra o campo (electrões), que atinge, no seu máximo, uma velocidade média \mathbf{v}_d (velocidade de “drift”).

O tempo médio entre choques é τ ; e, se considerar a velocidade segundo X proporcional ao tempo, o livre percurso médio segundo X será $\lambda = \langle v \rangle \times \tau$

A aceleração, g , dos electões provém de uma força aplicada

$$F = m \frac{dv}{dt} = m \gamma = -eE$$

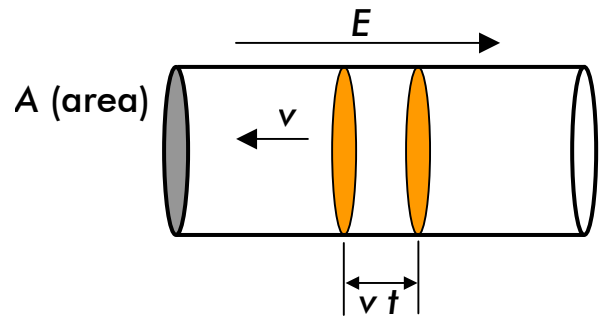
Densidade de corrente, J

q – carga que passa na área A
durante o tempo t

$$q = -n \langle v \rangle t A e$$

$$I = \frac{q}{t} = -n \langle v \rangle A e$$

$$J = \frac{I}{A} = -n \langle v \rangle e$$



Condutividade, σ , e mobilidade electrónica, μ

Lei de Ohm: a densidade de corrente $J = \sigma E$,
e a condutividade $\sigma = ne\mu$

$$\langle v \rangle = \gamma \tau = \gamma \frac{\lambda}{v_d} = -\frac{eE}{m} \frac{\lambda}{v_d}$$

$$J = -ne \langle v \rangle = \frac{ne^2 E \lambda}{m v_d}$$

$$\sigma = \frac{J}{E} = \frac{ne^2 \lambda}{m v_d}$$

$$\sigma = ne\mu \quad \therefore \quad \mu = \frac{e\lambda}{m v_d}$$

Modelo clássico – virtudes e defeitos

Prevê a lei de Ohm

Quando T aumenta a velocidade média dos electrões aumenta
(Maxwell-Boltzmann)

Mas... não prevê a variação linear de ρ com a temperatura nos
condutores nem a variação com T^5 para muito baixas
temperaturas. Prevê $\rho \propto \sqrt{T}$

Não explica os semicondutores nem portadores de carga positivos

Não explica os supercondutores: $\lambda \rightarrow \infty$

2.2. Modelo quântico de Sommerfeld (1928)

Electrões quantificados (partículas) sem potencial aplicado numa caixa 3D.

Níveis quantificados (2 electrões por nível)

$T = 0 \text{ K}$ o **Nível de Fermi** $n_F = N/2$

a Energia de Fermi para um condutor linear de comprimento L

$$E_F = \frac{h^2}{2m} \left(\frac{n_F}{2L} \right)^2$$

$T > 0 \text{ K}$

Os electrões têm que se distribuir por níveis discretos de energia e não pode haver mais do que 2 por nível. Em vez de Maxwell-Boltzmann a distribuição de electrões por níveis obedece a uma estatística de **Fermi-Dirac**

Distribuição de portadores de carga por níveis de energia (estatística Fermi-Dirac)

Numa banda de Bloch constituída por orbitais cristalinas a separação entre níveis é muito inferior à energia de agitação térmica ($k_B T$) à temperatura ambiente.

Separação entre níveis

Ex: Separação de níveis num cubo de Cu de 1 mm de aresta

$$d = 8.96 \text{ g/cm}^3, M.A.(Cu) = 63.55 \text{ g/mol}$$

$$\text{logo, } (8.96/63.55) \times N_A = 8.49 \times 10^{22} \text{ átomos/cm}^3$$

$$= 8.49 \times 10^{19} \text{ átomos/mm}^3$$

Se $4\beta = 4 \text{ eV}$ a separação de níveis é $4.7 \times 10^{-20} \text{ eV}$

Energia de agitação térmica à temperatura ambiente

$$\text{Constante de Boltzmann} = k_B = 1.380 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$$

$$\text{a } 298 \text{ K, } k_B T = 4.112 \times 10^{-21} \text{ J} = 0.026 \text{ eV}$$

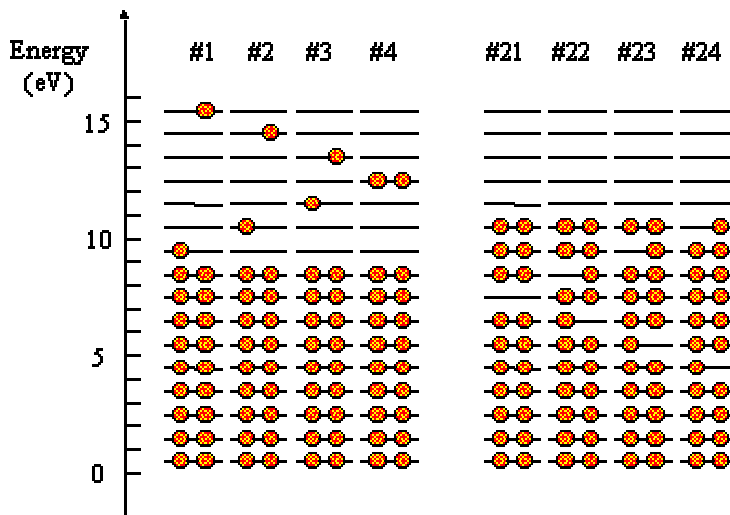
$$(1 \text{ eV} = 1.602 \times 10^{-19} \text{ J})$$

Distribuição de electrões (Fermiões) Fermi-Dirac

A energia distribui-se pelos electrões de forma semelhante ao que acontece para a energia cinética das partículas de um gás (Maxwell-Boltzmann). Com 2 diferenças:

- As energias estão quantificadas
- Não pode haver mais do que dois electrões por nível

Ex.: No diagrama seguinte mostram-se 8 das 24 configurações possíveis para 20 electrões com uma energia total de 106 eV.



IMPORTANTE:

As lacunas (ausência de electrões) são portadores positivos. Em Drude e Lorentz não existiam.

Os portadores positivos movem-se devido ao movimento dos electrões mas a mobilidade destes abaixo do nível de Fermi é menor (congestionamento de níveis). Logo, a mobilidade dos portadores positivos é menor.

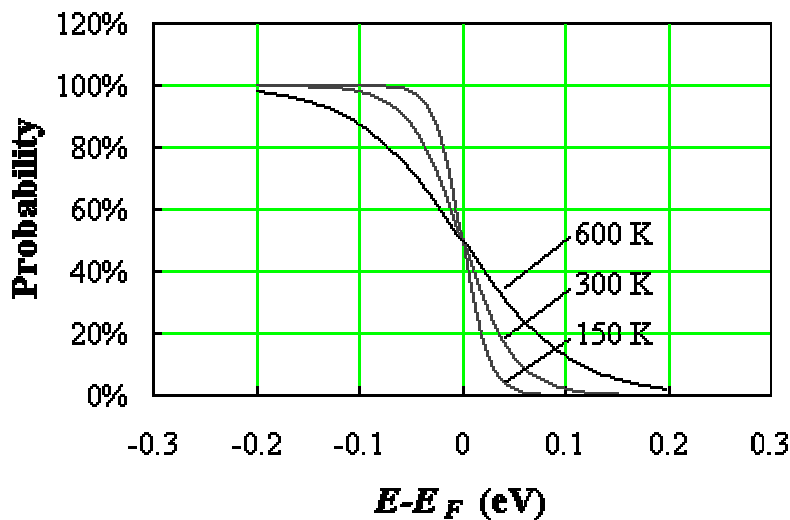
A probabilidade, $P(E)$, de que um nível de energia E esteja ocupado à temperatura T

Função de distribuição de Fermi-Dirac:

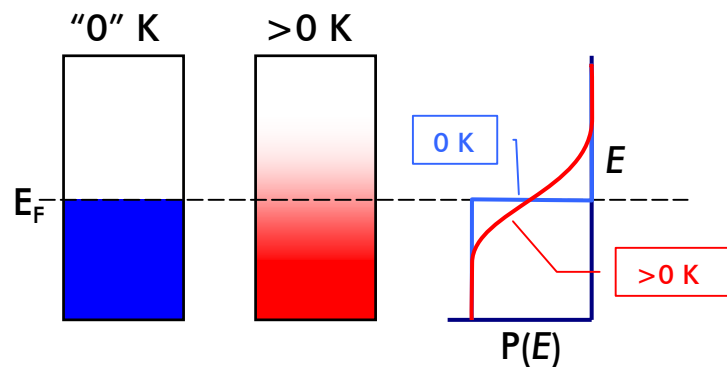
$$P(E) = \frac{1}{1 + e^{\frac{E - E_F}{k_B T}}}$$

Energia de Fermi (nível de Fermi): $P(E = E_F) = \frac{1}{2}$

A função de distribuição de Fermi-Dirac a 150, 300 e 600 K.



Distribuição de electrões num Condutor



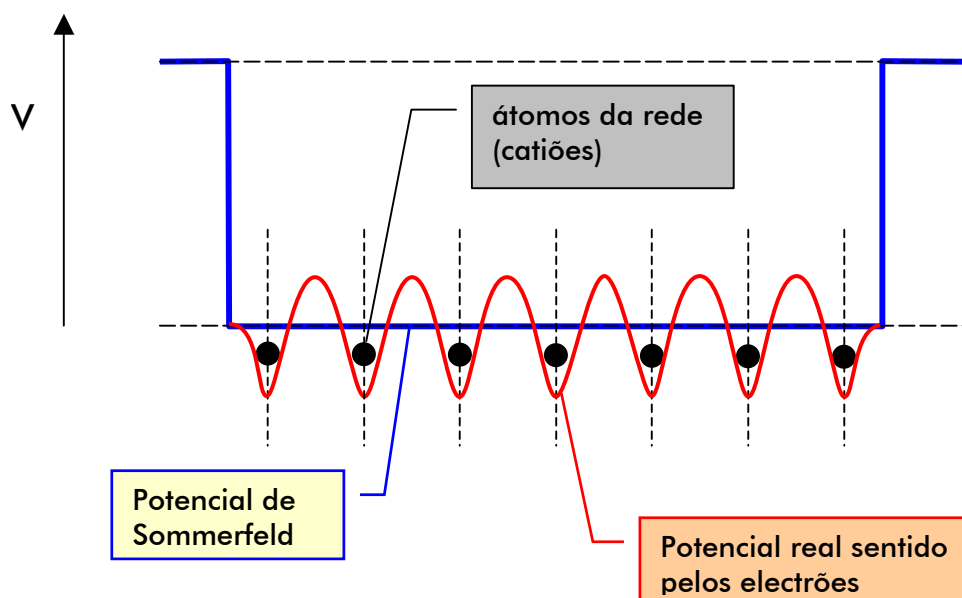
O "casamento" de Drude com Sommerfeld

Drude teve que introduzir os choques com a rede para evitar que os electrões fossem indefinidamente acelerados (a corrente aumentasse com o tempo)

Sommerfeld supõe o potencial constante no interior do metal (o que não é verdade) este potencial interage com os electrões. Para dar conta deste fenómeno introduz o conceito de massa efectiva

○ conceito de massa efectiva (m^*)

Os electrões na zona de E_F comportam-se como electrões livres. Mas interagem com o campo periódico proveniente da rede cristalina. Isto acelera-os ou retarda-os.



Este efeito pode ser tido em conta mudando a massa do electrão m_0 .

Usam-se diferentes massas efectivas conforme o objectivo do cálculo: densidade de estados ou mobilidade electrónica.

Tabela: Massa efectiva de portadores em Ge, Si e GaAs.

		Ge	Si	GaAs
Band gap 300 K	E_g (eV)	0.66	1.12	1.424
m^*_{el} (dens estados)	m^*_{el} / m_0	0.55	1.08	0.067
m^*_p (dens estados)	m^*_p / m_0	0.37	0.811	0.45
m^*_{el} (cond)	m^*_{el} / m_0	0.12	0.26	0.067
m^*_p (cond)	m^*_p / m_0	0.21	0.386	0.34

Velocidade dos electrões no nível de Fermi movimento aleatório com velocidades da ordem de 10^8 cm/s.

Velocidade de Fermi: $E_F = \frac{1}{2}m_e v_F^2$, $v_F = \sqrt{\frac{2E_F}{m_e}}$

Energia de Fermi, e Velocidades de Fermi

Elemento	Energia de Fermi eV	Velocidade de Fermi $\times 10^6$ m/s
Li	4.74	1.29
Na	3.24	1.07
K	2.12	0.86
Rb	1.85	0.81
Cs	1.59	0.75
Cu	7.00	1.57
Ag	5.49	1.39
Au	5.53	1.40
Be	14.3	2.25
Mg	7.08	1.58
Ca	4.69	1.28
Sr	3.93	1.18
Ba	3.64	1.13
Nb	5.32	1.37
Fe	11.1	1.98
Mn	10.9	1.96
Zn	9.47	1.83
Cd	7.47	1.62
Hg	7.13	1.58
Al	11.7	2.03
Ga	10.4	1.92
In	8.63	1.74
Tl	8.15	1.69
Sn	10.2	1.90
Pb	9.47	1.83
Bi	9.90	1.87
Sb	10.9	1.96

Densidade de Portadores

Os níveis de energia não estão uniformemente distribuídos. Há energias para as quais há mais níveis por eV do que outras.

Calcula-se a distribuição para partículas na caixa 3D.

$$g(E) = \frac{4\pi(2m_e^*)^{3/2}}{h^3} \sqrt{E}$$

A densidade de electrões dn em dE será

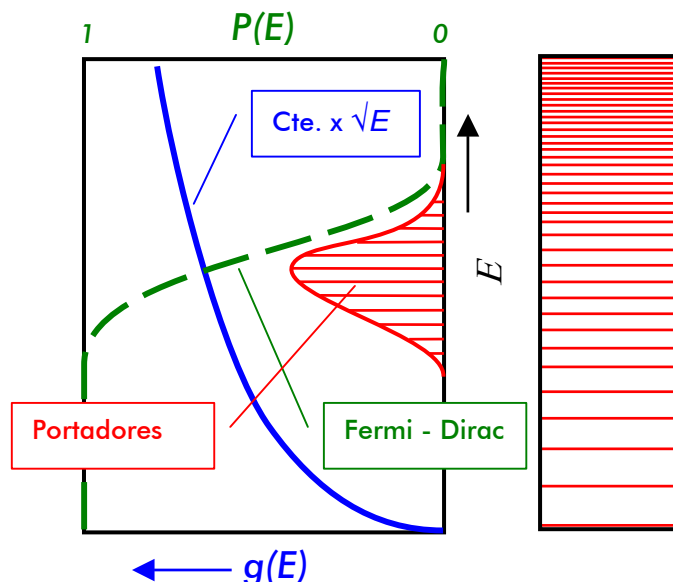
$$dn = g(E)P(E)dE$$

integrando em E para 0 K, será:

$$n = \frac{8\sqrt{2}\pi(m_e^*)^{3/2}}{h^3} \left(\frac{2}{3} E_F^{3/2} \right)$$

A temperaturas superiores o número de portadores n num condutor é praticamente independente de T (aumenta $< 1\%/100$ K).

Quantos portadores temos e qual a sua energia.



O número de portadores por unidade de volume, calculado por este método é quase idêntico ao que se obtém pela contabilização dos electrões de valência (viva Drude!).

Modelo de Sommerfeld – virtudes e defeitos

Virtudes não lhe faltam. A maioria dos conceitos podem ser usados no modelo mais elaborado de Bloch-Brillouin

Porém, não prevê nada do que está relacionado com orbitais e interação entre orbitais. Não prevê a existência de semicondutores e não prevê variações de densidades de estados dentro duma banda resultantes da estrutura electrónica dos átomos.

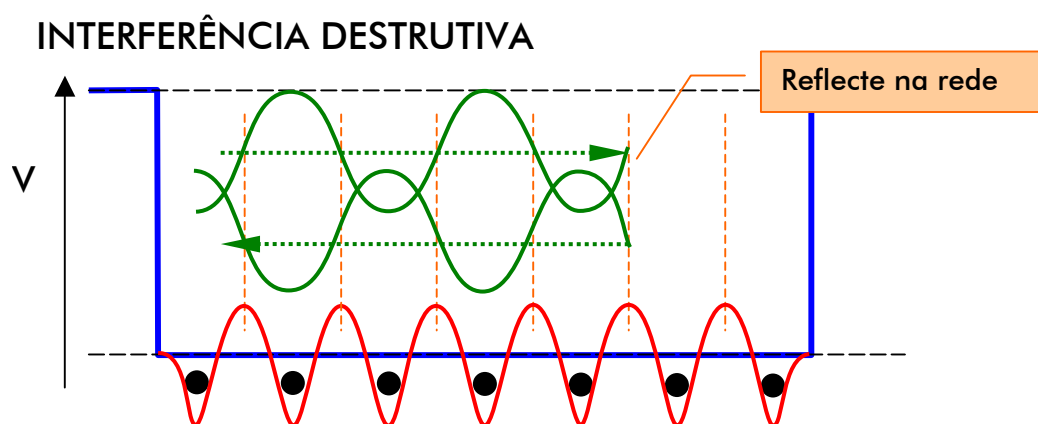
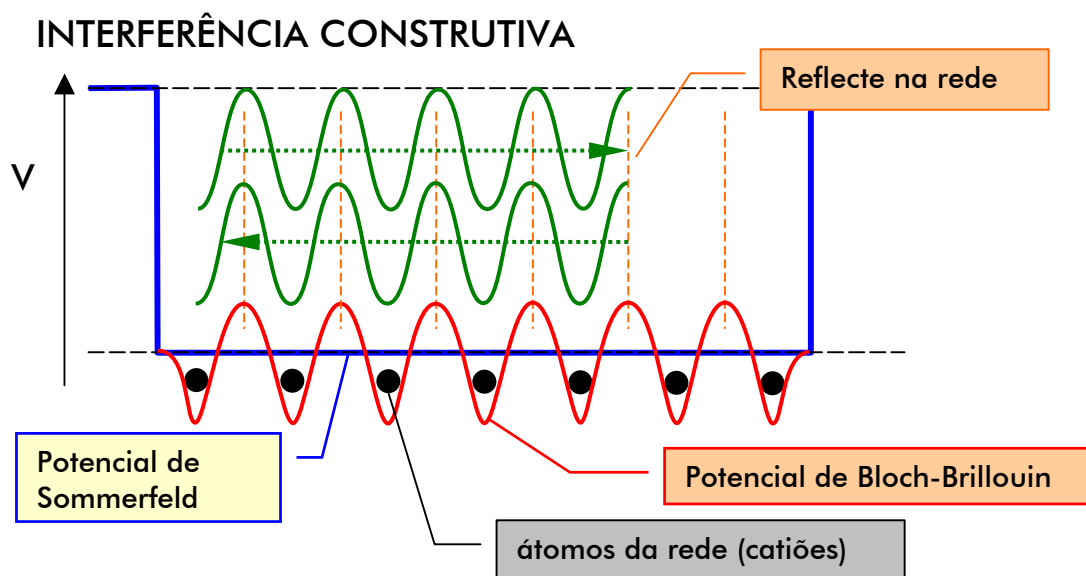
2.3. Modelo quântico de Bloch-Brillouin

- 1) Modelo quântico de fosso de potencial (como o de Sommerfeld).
- 2) O fosso de potencial não é constante, tem em conta o potencial periódico criado pelos iões.
- 3) As repulsões inter-electrónicas são desprezadas.

Como são retardados os electrões (massa efectiva, m^*) em Bloch-Brillouin.

Em vez de choques com átomos interacções com vibrações de rede (fonões).

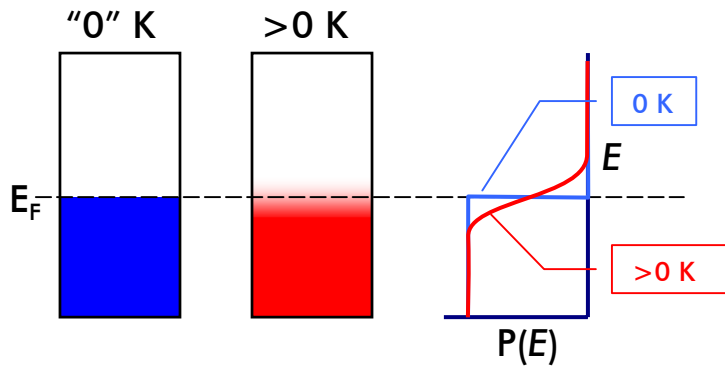
Como aparecem as bandas permitidas e proibidas em Bloch-Brillouin (interpretação de Bragg).



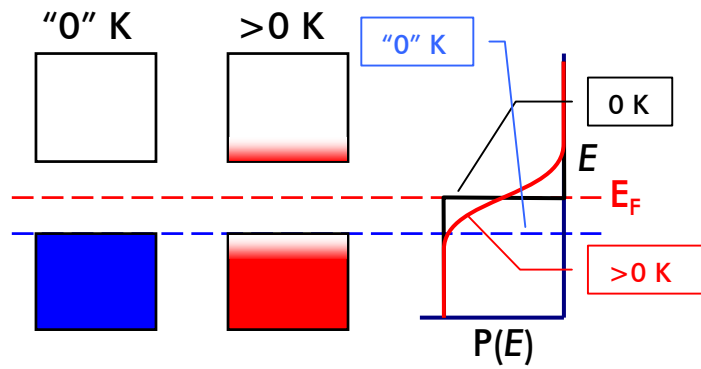
Nem todas as frequências (energias) são permitidas. Há bandas de níveis permitidos e bandas proibidas (interferência destrutiva).

Bloch-Brillouin explica os semicondutores intrínsecos. Junto à banda proibida a densidade de estados diminui (a interferência começa a ser parcialmente destrutiva).

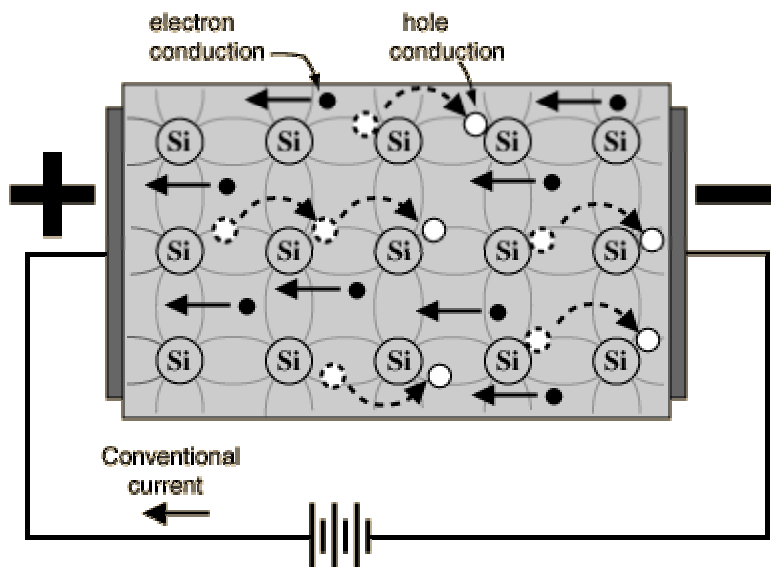
Energia de Fermi – Dependência da temperatura
Condutor



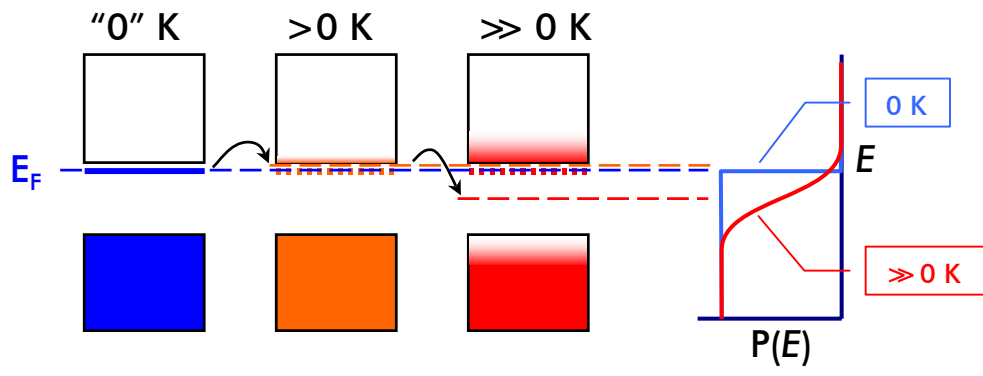
Semiconductor intrínseco (note-se que 0 K é uma temperatura teórica)



Condução por lacunas e electrões num semiconductor intrínseco



Semiconductor extrínseco tipo n



3. Densidade e mobilidade de portadores de carga

3.1. Densidade e mobilidade de portadores de carga – METAIS

Mobilidade dos Portadores

A mobilidade das lacunas é inferior à dos electrões.

A mobilidade dos portadores é:

$$\rho \propto T \text{ para } T \gg \Theta_D$$

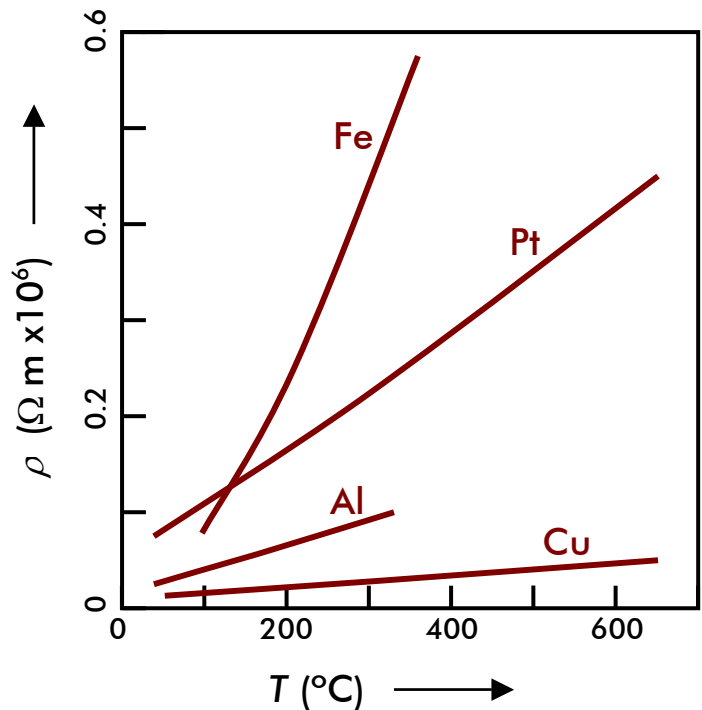
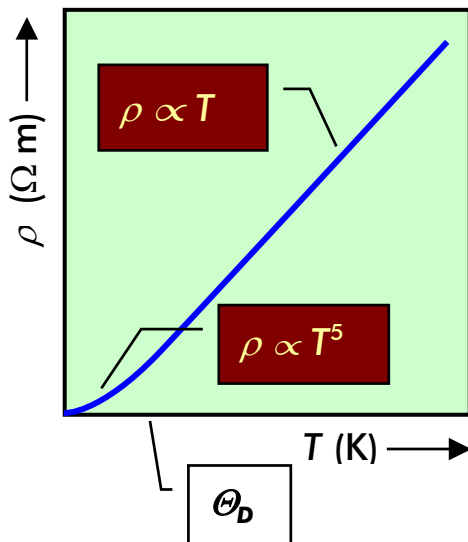
$$\rho \propto T^5 \text{ para } T \ll \Theta_D$$

(Θ_D temperatura crítica de Debye)

Dependência da Temperatura

Comportamento metálico: $\rho \propto T$ para $T \gg \Theta_D$ (temperatura crítica de Debye)

A variação de ρ resulta apenas da redução da mobilidade dos portadores causada pelas vibrações da rede (fonões).



Efeito de impurezas

Regra de Mattheison

$$\rho = \rho_0 + \rho_T$$

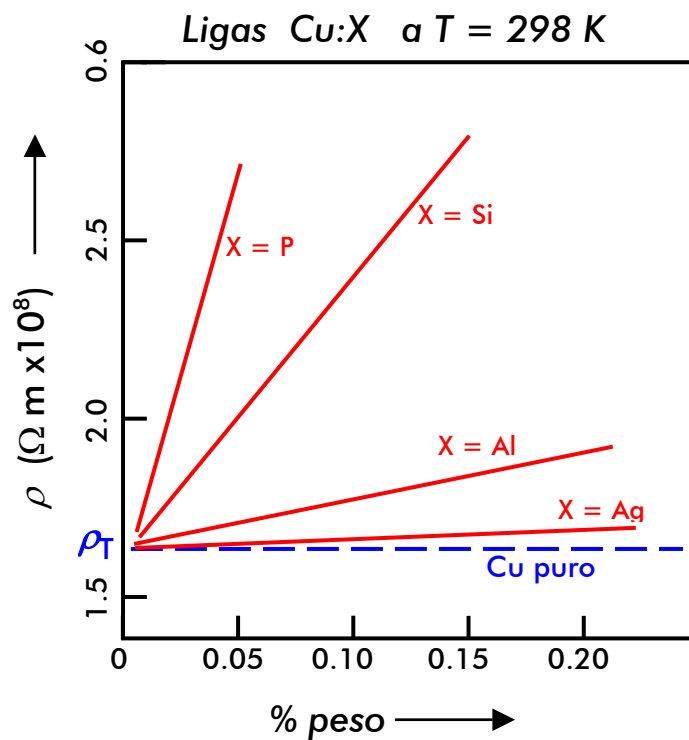
ρ_0 - resistividade residual (independente de T)

ρ_T - resistividade térmica

ρ_0 resulta das impurezas. Relaciona-se com a concentração de impurezas pela **Regra de Nordheim**

$$\rho_0 = Ax(1-x), \quad \text{se } x \ll 1, \quad \rho_0 \approx Ax$$

$$\rho_0 \approx Ax + \rho_T$$



3.2. Densidade e mobilidade de portadores de carga – SEMICONDUTORES INTRÍNSECOS

Densidade de Portadores

Densidade de estados

$$g_c(E) = \frac{8\pi\sqrt{2}}{h^3} (m_e^*)^{3/2} \sqrt{E - E_C}, \quad E \geq E_C$$

$$g_v(E) = \frac{8\pi\sqrt{2}}{h^3} (m_h^*)^{3/2} \sqrt{E_V - E}, \quad E \leq E_V$$

Densidade de portadores

$$n(E) = g_c(E) P(E)$$

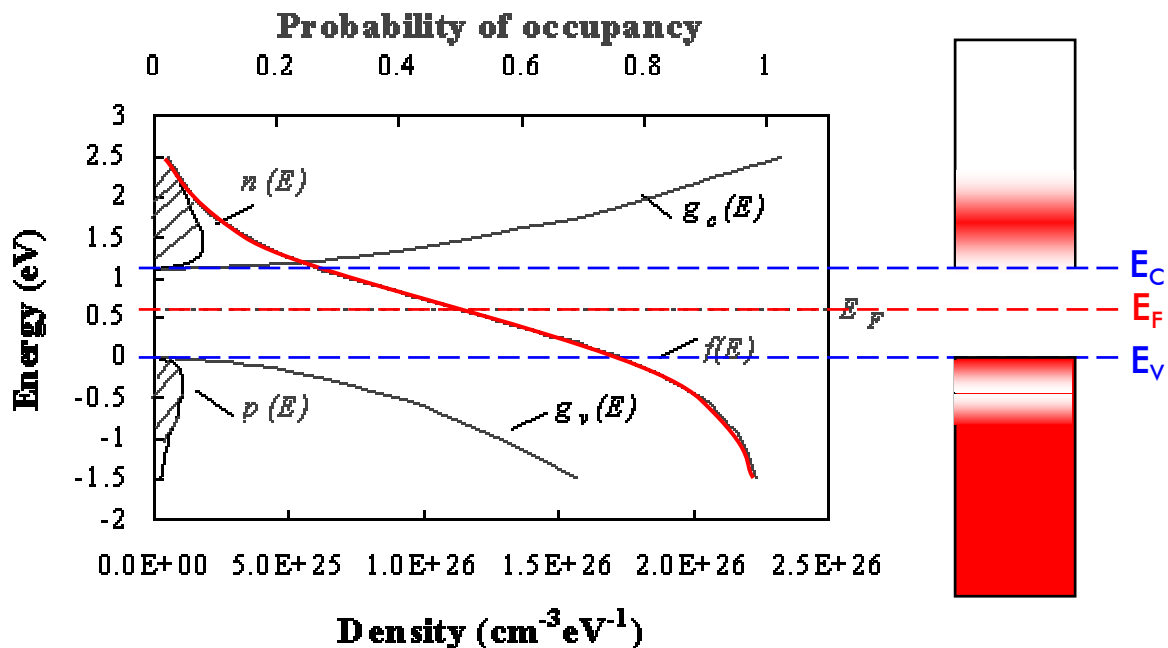
$$p(E) = g_v(E) P(E)$$

$$n = \int_{E_C}^{E_{up}(\infty)} g_c(E) P(E) dE$$

$$\approx N_C \exp\left(-\frac{E_F - E_C}{k_B T}\right), \quad N_C = 2 \left(\frac{2\pi^3 m_e^* k_B T}{h^2}\right)^{3/2}$$

$$p = \int_{E_{low}(-\infty)}^{E_V} g_v(E) P(E) dE$$

$$\approx N_V \exp\left(-\frac{E_V - E_F}{k_B T}\right), \quad N_V = 2 \left(\frac{2\pi^3 m_h^* k_B T}{h^2}\right)^{3/2}$$



Localização do nível de Fermi (aproximadamente a meio da banda proibida)

$$n = p \quad \therefore \quad N_C \exp\left(-\frac{E_F - E_C}{k_B T}\right) = N_V \exp\left(-\frac{E_V - E_F}{k_B T}\right)$$

$$E_F = \frac{E_C + E_V}{2} + \frac{kT}{2} \ln \frac{m_h^*}{m_e^*}$$

$$m_h^* \approx m_e^* \quad \therefore \quad E_F \approx \frac{E_C + E_V}{2}$$

Mobilidade dos Portadores

$$\mu_e = aT^{-3/2}, \quad \mu_h = bT^{-3/2}$$

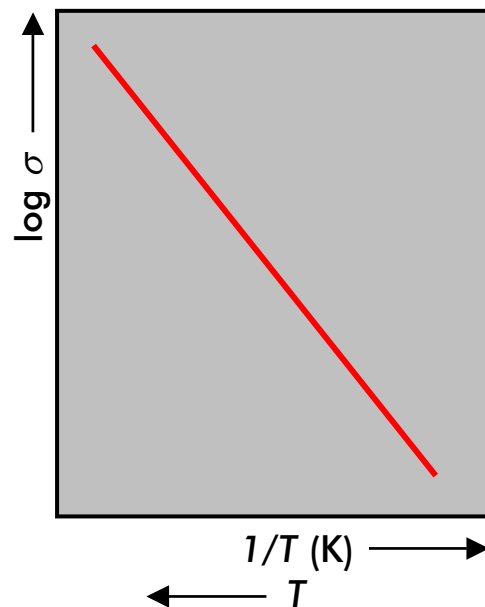
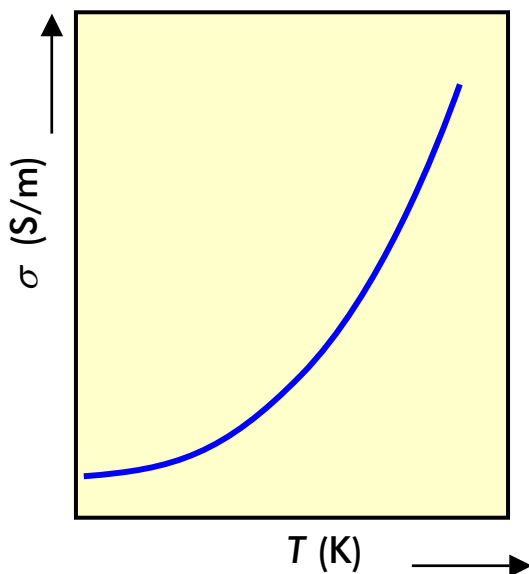
Dependência da Temperatura

$$\sigma = ne\mu, \quad n = p$$

$$\sigma = \sigma_n + \sigma_p = ne\mu_n + pe\mu_p$$

$$\sigma = \sigma_0 T^{3/2} \exp\left(-\frac{E_G}{2k_B T}\right) T^{-3/2} = \sigma_0 \exp\left(-\frac{E_G}{2k_B T}\right)$$

$$\ln \sigma = \ln \sigma_0 - \frac{E_G}{2k_B} \frac{1}{T}$$



3.3. Densidade e mobilidade de portadores de carga – SEMICONDUTORES EXTRÍNSECOS

Densidade de Portadores

1) 0 K – não há portadores

2) ZONA EXTRÍNSECA ou DE IMPUREZA - Temperaturas baixas
 $k_B T \ll E_{id}$ ou $k_B T \ll E_{ia}$

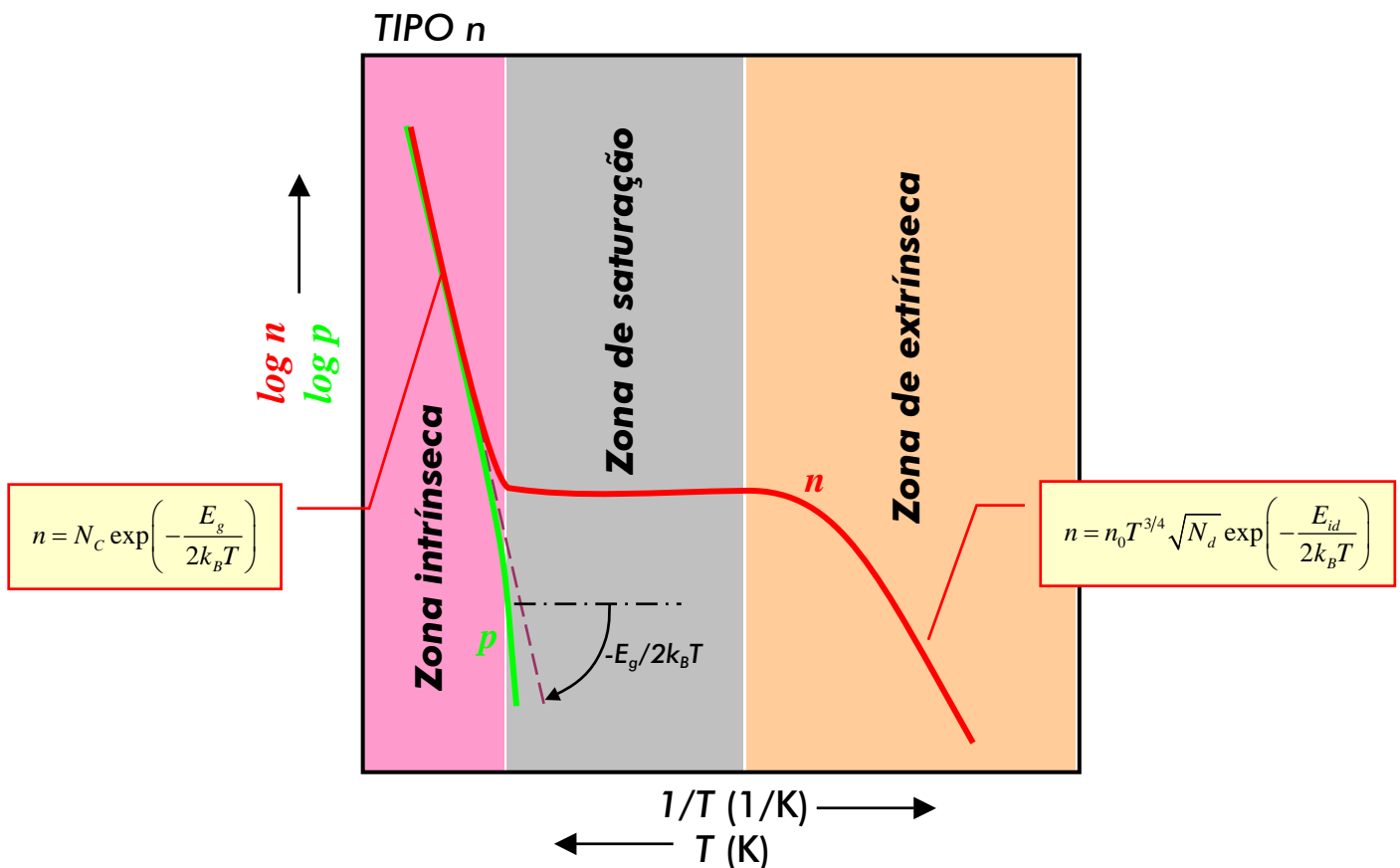
$$n = n_0 T^{3/4} \sqrt{N_d} \exp\left(-\frac{E_{id}}{2k_B T}\right)$$

$$p = p_0 T^{3/4} \sqrt{N_a} \exp\left(-\frac{E_{ia}}{2k_B T}\right)$$

Onde $N_{d,a}$ é a concentração de impurezas.

3) ZONA DE SATURAÇÃO – A impureza ionizou mas $k_B T \ll E_g$

4) ZONA INTRÍNSECA



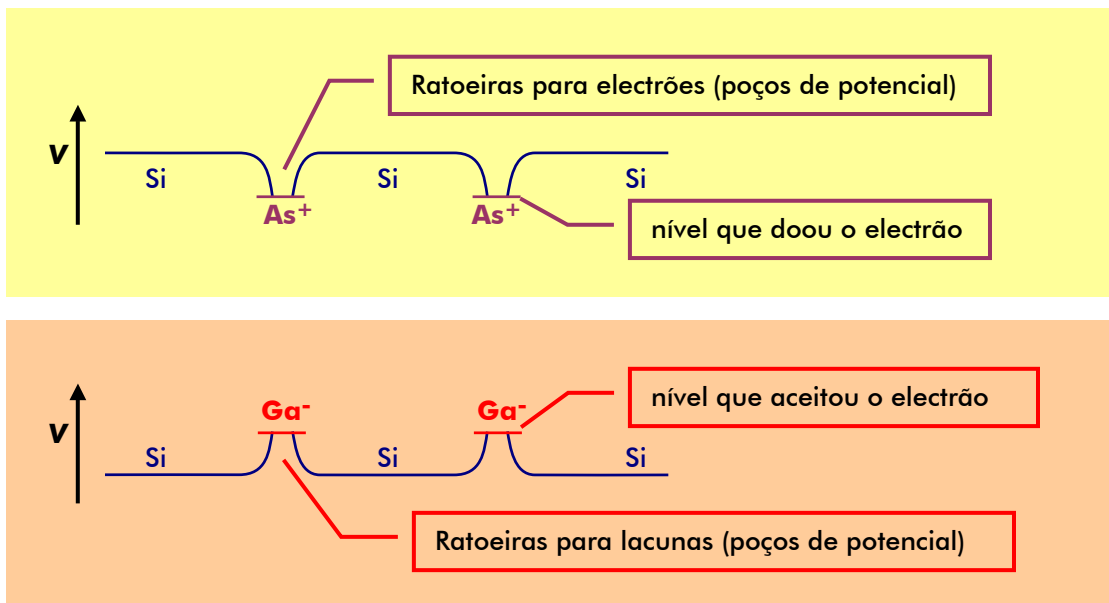
Mobilidade dos Portadores

Componente Intrínseca

Vibrações térmicas atrasam o movimento dos portadores.

$$\mu_{n,p} = \mu_0 T^{-3/2}$$

Componente devida às Impurezas



Quando T aumenta os portadores escapam-se das ratoeiras

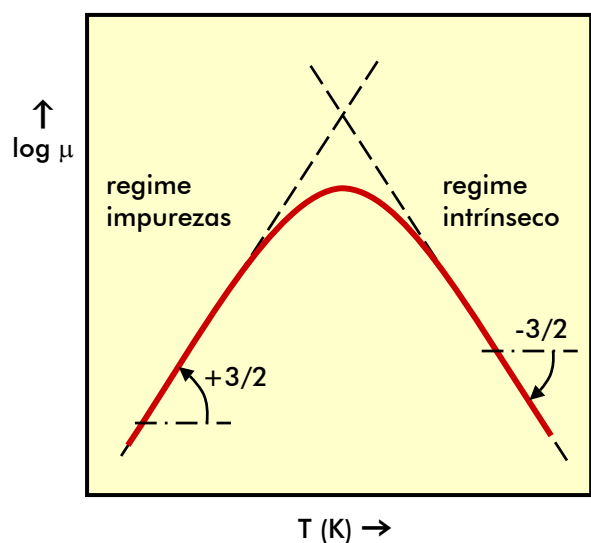
$$\mu_i = \mu_{0i} T^{+3/2}$$

$$\rho = \rho_{imp} + \rho_{intr}$$

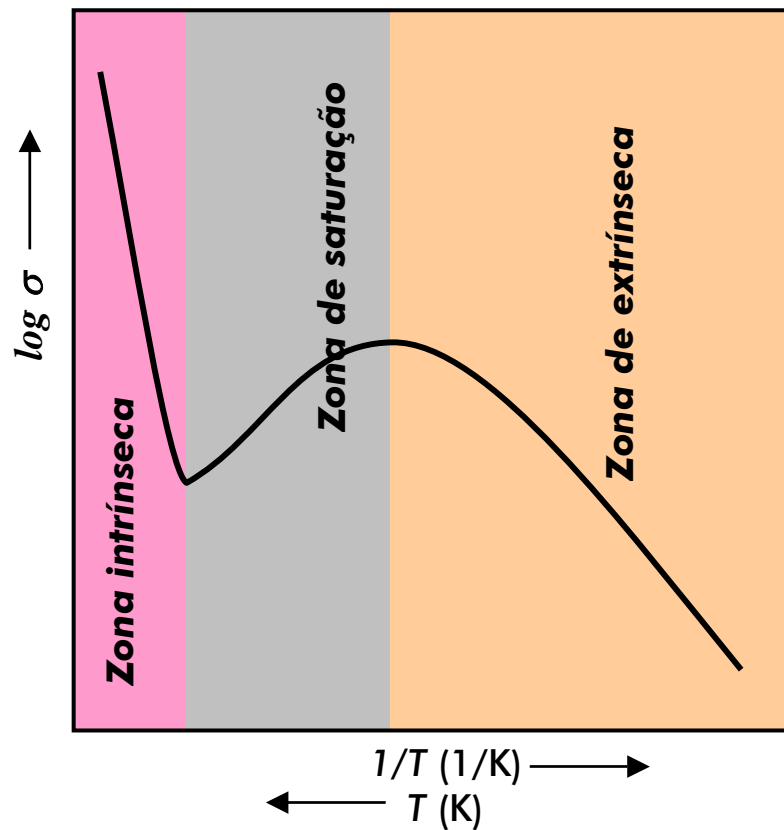
$$\frac{1}{\sigma} = \frac{1}{\sigma_{imp}} + \frac{1}{\sigma_{intr}}$$

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{\mu_{imp}} + \frac{1}{\mu_{intr}}$$

$$\mu = \frac{\mu_{imp} \mu_{intr}}{\mu_{imp} T^{3/2} + \mu_{intr} T^{-3/2}}$$



Dependência da Temperatura



Alguns endereços Internet

Introdução aos semicondutores:

<http://ece-www.colorado.edu/~bart/book/contents.htm>

<http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/solids/semcn.html>

Introdução aos semicondutores com uma explicação invulgarmente clara do funcionamento de alguns "devices".

<http://britneyspears.ac/lasers.htm>

4. Exemplos e Aplicações

4.1. Potencial de extracção e emissão termiónica

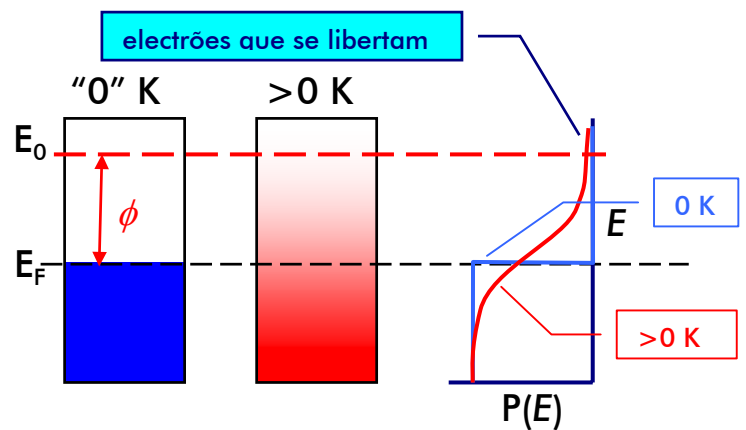
Potencial de extracção, ϕ : Energia para retirar um electrão a um metal

Num metal o nível de Fermi coincide com o último nível ocupado a 0K.

$$\phi = E_0 - E_F$$

Ex: ϕ (Ni) = 4.61 eV

ϕ (W) = 4.52 eV



Emissão Termiónica

Electrões que se libertam (Richardson-Dushman)

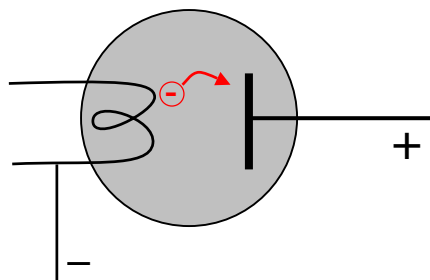
$$g(E) P(E) dE = cte \sqrt{E} \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right)} dE$$

Integrada tendo em conta que $E = mv^2/2$ (recordar Drude)

e para $E \gg E_F$ $1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right) \approx \exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right)$

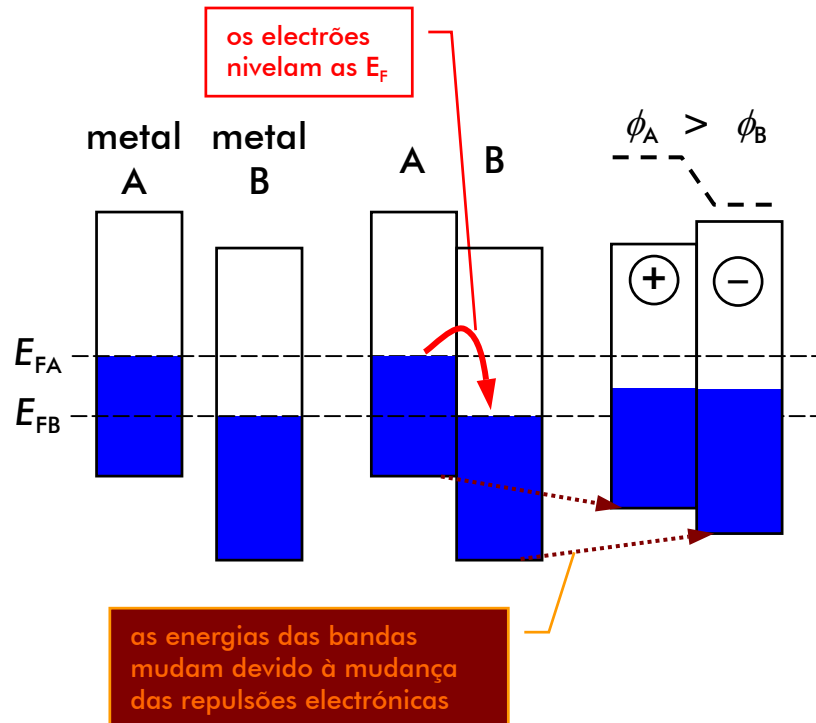
$$J = A_0 T^2 \exp\left(\frac{\phi}{k_B T}\right)$$

Ex: válvula díodo



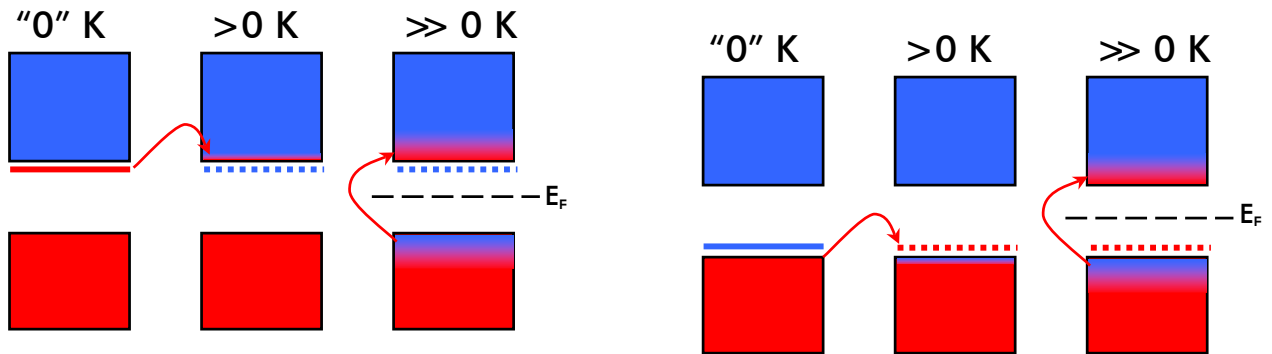
4.2. Contacto metal-metal

Dois metais A e B com diferentes energias de Fermi quando em contacto criam uma diferença de potencial, ϕ .



4.3. Junção p-n

Dois semicondutores, um tipo n e outro tipo p



Quando postos em contacto há uma redistribuição de cargas:

- 1° os electrões do semiconductor n vão ocupar as lacunas do p
- 2° a carga criada junto à interface repele os restantes electrões da banda de condução do semiconductor tipo p e as lacunas do tipo n

Em consequência, é criada uma zona sem portadores, portanto isolante, que não permite a passagem de electrões de p para n , potencial reverso. Pelo contrário, quando injectados electrões em n estes passam facilmente para p

