

## 7 SÓLIDOS

### 7.1 INTRODUÇÃO

No capítulo anterior descreveu-se como a estatística dispõe de ferramentas para estudar a distribuição das partículas nos diferentes estados. Falou-se de gases, hélio líquido e elétrons em sólidos. Para compreender um pouco melhor as forças que mantêm unidos os átomos e moléculas para formar os sólidos serão analisados os principais tipos de sólidos: iônicos, covalentes, moleculares e metálicos.

As forças que mantêm os átomos unidos são eletrostáticas, porém há diferenças no comportamento dos diversos tipos de sólidos, diferenças essas que provem da distribuição dos elétrons em torno dos átomos e das moléculas e da distância que se estabelece entre eles. A classificação em quatro tipos citada acima não engloba todos os tipos de ligações pois pode acontecer uma mistura desses tipos. As imperfeições, através das distorções que introduzem, também influenciam o comportamento do material.

### 7.2 SÓLIDOS IÔNICOS

De modo geral os sólidos iônicos são formados por uma combinação de átomos que tem a última camada quase completa e de átomos que tem um só elétron na última camada. Imagine-se dois átomos desse tipo, ao serem aproximados, eles tem tendência de se acoplar de modo a ficar com a última camada completa e, para realizar isso, um deles cede um elétron ao outro de modo que ambos passam a ser íons, um positivo e outro negativo, com a última camada completa. Numa rede cristalina formada com esse tipo de ligação, cada íon positivo é rodeado de íons negativos e vice-versa. Essa distribuição dá origem a forças de interação entre os íons que os mantêm unidos formando um sólido. Um exemplo comum é o cloreto de sódio formado de íons positivos de sódio e íons negativos de cloro. Esse sal quando dissolvido na água a torna condutora pois ela passa a ter íons dissociados que funcionam como portadores de carga e portanto de corrente.

Um cristal de cloreto de sódio será examinado mais atentamente. O átomo de sódio tem 11 elétrons distribuídos da seguinte forma:  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ , o último elétron está sozinho na última camada, a camada 3. O átomo de cloro tem 17 elétrons segundo a seguinte distribuição  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$ , o que indica que na última camada falta um elétron para torná-la completa.

Para ionizar o átomo de sódio isolado é necessário fornecer ao elétron uma energia de 5,1 eV. O átomo de cloro ao incorporar um elétron libera um excesso de energia no valor de 3,8 eV, denominado afinidade eletrônica. Pode-se dizer então que para formar os dois íons é preciso gastar 1,3 eV. Essas considerações são válidas supondo que se trate de um átomo de cloro ou de sódio afastados sem interação entre si ou externa, porém para analisar a energia envolvida na formação da rede cristalina é preciso avaliar a energia potencial que cada átomo cria na posição do outro e observar o que sucede se esses átomos forem aproximados um do outro. A equação da energia potencial que um átomo cria na posição do outro quando estão afastados é do tipo:

$$V = -\frac{kq}{r} tG_2 \quad (7.1)$$

onde  $r$  é a distância entre os dois átomos. Essa expressão diz que quanto menor a distância entre eles menor será a energia potencial do sistema formado por eles. Como qualquer sistema sempre procura ficar no estado de energia mínimo é de se imaginar que esses átomos irão se aproximar até se interpenetrarem, porém não é isso que acontece. Abaixo de uma certa distância, que no caso do cloreto de sódio é de  $2,4\text{Å}$ , começa a ser aplicável o princípio de exclusão de Pauli, porque os dois átomos começam a constituir um único sistema e então cada elétron tem seus níveis de energias permitidos deslocados para que os dois elétrons (um de cada átomo) não fiquem no mesmo estado. O processo de aproximação custa energia, e quanto mais próximos estiverem os átomos, mais energia é necessária, este fato também pode ser interpretado considerando que a energia potencial cresce tanto que torna inviável a aproximação dos átomos abaixo de uma certa distância. Assim, pode-se dizer que, a aproximação dos átomos que decresce a energia potencial, a medida que distância diminui, até um certo ponto,  $r_0$ , e a partir dele passa a aumentá-la. Esse comportamento está representado na fig. 7.1 que mostra a energia potencial de um sistema de dois átomos, um de cloro e um de sódio, a medida que a distância entre eles é diminuída.

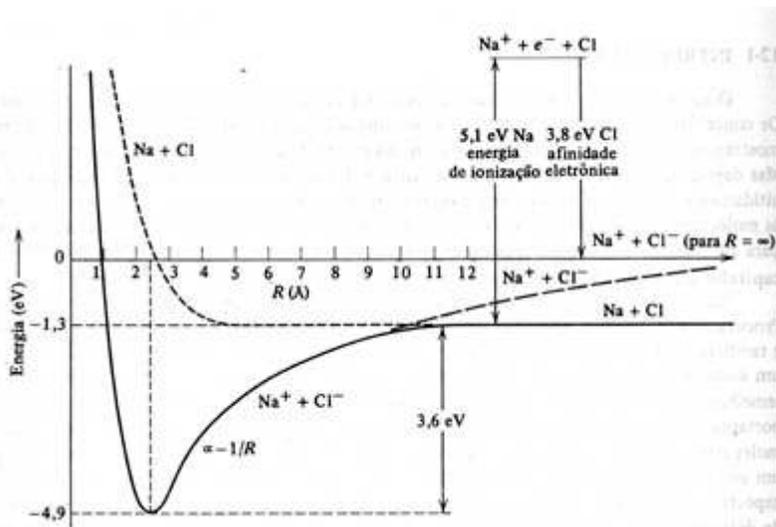


Fig. 7.1 - Energia potencial dos íons  $\text{Na}^+$  e  $\text{Cl}^-$  em função da distância de separação,  $r$ .

Pela figura nota-se que a distância de equilíbrio,  $r_0$ , é de  $2,4 \text{ Å}$ . Esse valor é aproximadamente igual ao espaçamento entre os átomos na rede cristalina do cloreto de sódio,  $2,8 \text{ Å}$ , a diferença pode ser atribuída a influência dos átomos vizinhos. No gráfico pode-se ver também que a energia que é preciso fornecer ao sistema para romper a ligação entre dois íons, a chamada energia de dissociação, vale  $4,23 \text{ eV}$ . Essa energia é aquela que falta aos átomos para se separarem.

### 7.3 SÓLIDOS COVALENTES

Num sólido constituído de átomos iguais não pode haver ligações iônicas porque para isso é preciso que haja alguns átomos com tendência de perder elétrons e outros com tendência de ganhar elétrons. A solução nesse caso é o compartilhamento de um elétron por dois átomos constituindo a ligação chamada covalente. Num sólido formado por átomos com quatro elétrons na última camada, como o silício e o germânio, formam-se quatro ligações covalentes, ou seja, quatro compartilhamentos. Essas ligações são, de modo geral, fortes e conferem uma grande resistência mecânica ao material. A estrutura do silício é do tipo da do diamante cujas ligações covalentes estão em direções tais que formam os eixos que ligam o centro de um tetraedro aos seus vértices. Essa representação é difícil de desenhar e para a compreensão dos fenômenos

elétricos, que serão descritos a seguir, ela pode ser substituída por um esquema simplificado em que as ligações covalente estão todas no mesmo plano, da seguinte forma:

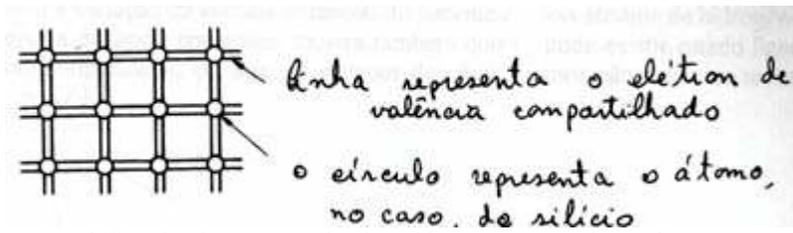


Fig.7.2 - Representação simplificada de uma rede de silício mostrando as ligações covalentes

Para fazer uma análise das ligações covalentes entre dois átomos, usando a mecânica quântica, se iniciará fazendo a representação do poço de potencial, da função de onda e da densidade de probabilidade para dois átomos de hidrogênio afastados (fig. 7.3) e próximos (fig. 7.4).

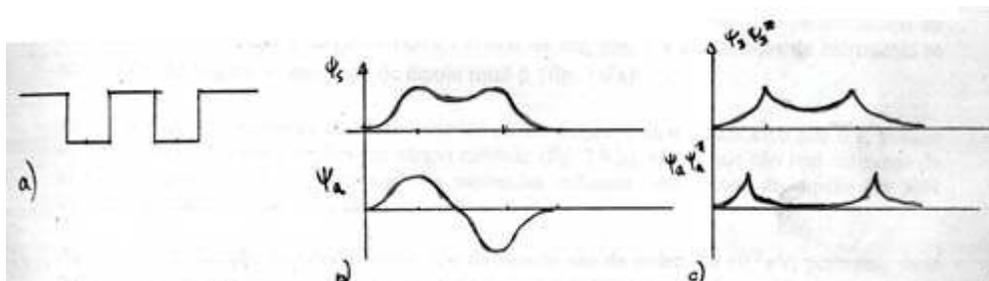


Fig. 7.3 - Representação para dois átomos afastados de : (a) poço de potencial; (b) função de onda (c) densidade de probabilidade.

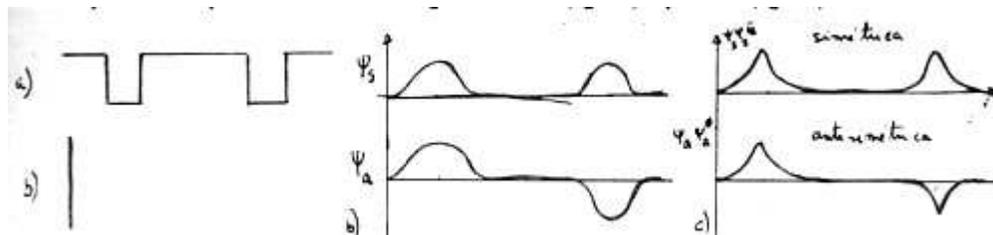


Fig. 7.4 - Representação para dois átomos próximos de : (a) poço de potencial; (b) função de onda (c) densidade de probabilidade

Ao se aproximar esses átomos as funções de onda e a densidade de probabilidade vão se alterando em função do acoplamento que vai se formando. As funções de onda podem ter um comportamento simétrico ou antissimétrico porque a troca de um elétron entre os átomos não modifica a densidade de probabilidade que é simétrica já que os dois poços de potencial criados pelos dois núcleos são idênticos. Essa aproximação faz com que os dois átomos deixem de ser dois sistemas isolados e passem a formar um único sistema. O estado desse sistema não pode ter dois elétrons com o mesmo conjunto de valores para os números quânticos pois eles devem obedecer ao Princípio de Exclusão de Pauli.

Assim se os spins forem antiparalelos os elétrons terão função de onda simétrica e poderão estar mais próximos; se porém os spins forem paralelos a função de onda deverá ser antissimétrica e os picos da densidade de probabilidade estão mais afastados, o que garante que os elétrons não estarão ocupando o mesmo estado. A figura 7.5, que mostra a variação da energia potencial do sistema de dois átomos de hidrogênio, a medida que se diminui a distância entre eles, mostra também que só pode existir estado ligado quando os elétrons são antiparalelos, ou seja, os elétrons dos dois átomos não estão no mesmo estado.

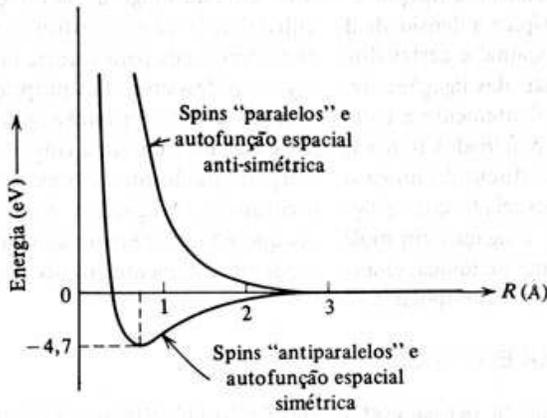


Fig. 7.5 - Energia potencial de uma molécula de H<sub>2</sub> com spins paralelos e antiparalelos

#### 7.4 SÓLIDOS MOLECULARES

Moléculas que não se ligam de forma iônica ou por ligações covalentes podem se manter unidas através de forças eletrostáticas fracas de atração intermolecular causadas por dipolos elétricos. Há moléculas que tem momento de dipolo elétrico permanente e outras transitório. As forças criadas desse modo são as chamadas forças de “van der Waals” e aparecem nos cristais moleculares, como, por exemplo, em muitos compostos orgânicos, gases inertes e gases comuns como oxigênio, nitrogênio e hidrogênio no estado sólido.

Um exemplo de dipolo permanente é o caso das moléculas de água, em que os momentos de dipolo  $\vec{m}_1$  e  $\vec{m}_2$ , entre a carga elétrica do átomo de oxigênio e a dos átomos de hidrogênio se somam dando origem ao momento de dipolo total  $\vec{p}$  (fig. 7.6.a).

Há moléculas cujo momento de dipolo elétrico médio é nulo, mas o instantâneo não o é, porque ocorrem flutuações nas posições das cargas elétricas (fig. 7.6.b), são as que não tem momento de dipolo permanente. Nesse caso algumas moléculas induzem momentos de dipolo em suas vizinhas surgindo atração entre elas.

As energias de ligação envolvidas nesse tipo de ligação são da ordem de  $10^{-2}$  eV, portanto, bem menores que as dos cristais iônicos e covalentes, o que indica ligações fracas. Essa característica determina o comportamento dos materiais moleculares: são deformáveis, compressíveis, maus condutores de eletricidade e solidificam-se em temperaturas baixas.

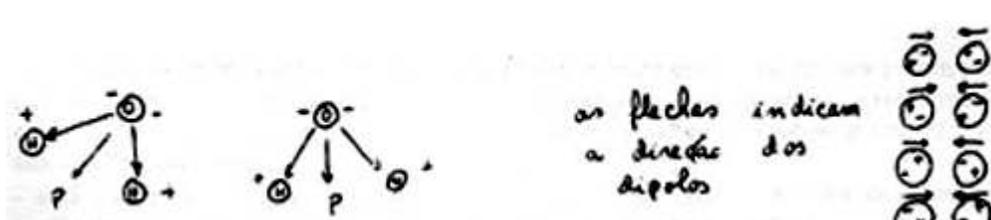


Fig. 7.6 a) moléculas de água com dipolo permanente

b) moléculas sem dipolo permanente mas polarizadas por influências mutuas

## 7.5 SÓLIDOS METÁLICOS

Nesse tipo de sólido pode-se dizer que os elétrons não são compartilhados só por dois átomos vizinhos mas por todos os átomos da rede, ou seja, todos os elétrons pertencem a todos os átomos. Pode-se imaginar que os íons positivos estão mergulhados num “mar” de elétrons que os mantém unidos através de forças elétricas. Esses elétrons originam-se das subcamadas mais externas dos átomos, das quais se libertam com a energia térmica fornecida pela rede em vibração.

A grande quantidade de elétrons “livres” é responsável pelas principais características dos sólidos metálicos. Esses elétrons atuam como transportadores de carga e de energia térmica determinando que o material seja bom condutor de eletricidade e de calor. Outro comportamento determinado pela presença dos elétrons livres é que os metais são opacos. Isso ocorre porque a radiação do espectro eletromagnético na região do visível é facilmente absorvida pelos elétrons já que estando livres não estão limitados a absorção de somente certas quantidades bem definidas de energia como os elétrons ligados.

## 7.6 CARACTERÍSTICAS GERAIS DOS SÓLIDOS

Baseando-se no que foi apresentado nas seções anteriores percebe-se que as propriedades dos diversos materiais dependem fundamentalmente de suas ligações atômicas e da forma de preenchimento das bandas de condução e de valência.

Num cristal os elétrons tem tendência de ocupar os níveis mais baixos de energia. Considere-se o caso da temperatura ser baixa e portanto dos elétrons estarem ocupando os níveis fundamentais. Quando se aplica um campo elétrico os elétrons ganham energia e podem mudar de nível para valor mais energéticos. Há diversas possibilidades para o preenchimento das bandas:

a) num material em que a banda de valência está completa e existe um grande gap os elétrons precisam receber uma grande quantidade de energia para passar para a banda de condução, nesse caso poucos elétrons se desligarão dos seus átomos, ficando a banda de valência praticamente vazia o que caracteriza o comportamento de um material *isolante*.

b) se a banda de valência está parcialmente preenchida há duas possibilidades:

I) grande número de elétrons

- - se o gap é praticamente nulo os elétrons podem passar para um estado de maior energia ou para a banda de condução com pequenas energias, sendo muito fácil produzir elétrons livres, esses materiais são os *condutores*.

II) pequeno número de elétrons

- - se a banda de valência está cheia mas o gap é relativamente estreito os elétrons podem passar para a banda de condução ao receberem energias não muito grandes. Esses materiais comportam-se como isolantes a baixas temperaturas e condutores em temperaturas mais altas, são os *semicondutores*.
- - se a banda de valência não está cheia e o gap é relativamente estreito esses materiais comportam-se como condutores a baixas temperaturas, são os *semi-metais*.

A figura 7.7 mostra as possíveis formas de preenchimento das bandas.

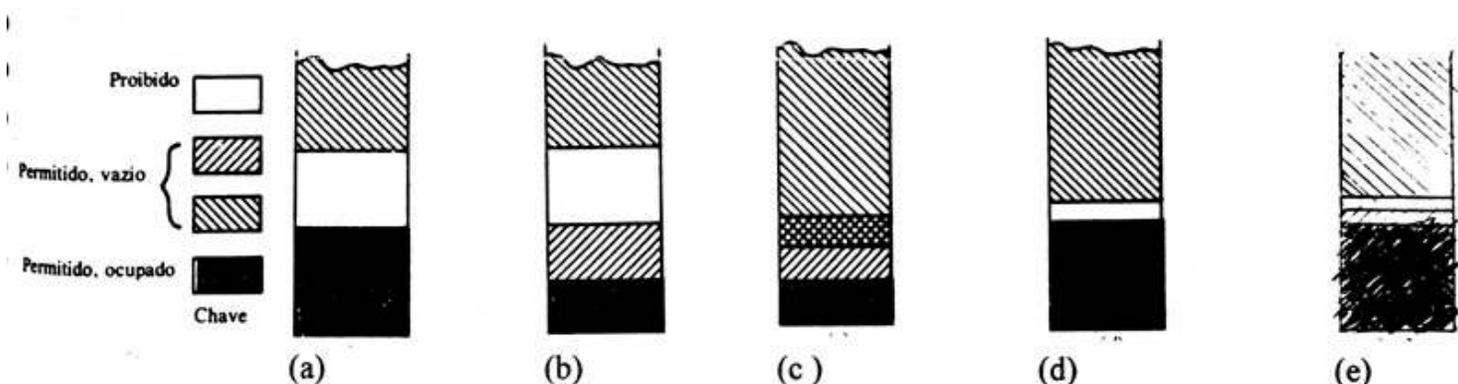


Fig. 7.7 - Possíveis preenchimentos das estruturas de bandas para um sólido: a) isolante; b) condutor; c) condutor; d) semicondutor; e) semi-metal.

A seguir segue uma tabela (Tab. 7.1) com um resumo das principais características dos diversos tipos de materiais cristalinos, características essas que podem ser explicadas a partir da forma de preenchimento das bandas desses materiais.

TABELA 7.1 -CARACTERÍSTICAS DOS DIFERENTES TIPOS DE MATERIAIS CRISTALINOS

Caraterísticas	Covalentes	Iônicos	Moleculares	Metálicos
Forças	fortes provenientes de elétrons compartilhados por diferentes átomos	elétricas, fortes entre os íons de sinais opostos	Van de Walls (eletrostáticas fracas causadas p/ dipolos elétricos)	provenientes de elétrons compartilhados por todos os átomos
Energias envolvidas	~ 4,5 eV (para o H)	menor que de íons separados ~ 5 eV	~ 10 <sup>-2</sup> eV	
Comportamento plástico	Duros e difíceis de deformar causada pela rigidez da estrutura eletrônica	Duros	Facilmente deformáveis	Deformáveis
Condutibilid. elétrica e calorífica	Maus condutores por ausência de elétrons livres	Maus condutores por ausência de elétrons livres	Maus condutores por ausência de elétrons livres	Bons condutores de eletricidade e calor pois há elétrons livres.
Estado físico	Elevado ponto de fusão	Elevado ponto de fusão	Baixo ponto de condensação	Sólido a temperatura ambiente
Disposição	Ligações direcionais que determinam o arranjo geométrico da estrutura	Íons positivos e negativos alternados formando empilhamentos	Moléculas com distância da ordem do tamanho da molécula	Rede regular de íons positivos imersos num "mar de elétrons"
Caraterísticas	Alguns (diamante) absorvem fônons de infravermelho e fótons de ultravioleta o que os torna transparentes	Não absorvem energia na região do visível são portanto transparentes a temperatura ambiente		Absorvem fótons e fônons do visível, porisso são opacos. Os elétrons movem-se sob campo magnético
Exemplos	diamante, Semicondutores	a maioria dos sais, por exemplo o NaCl	Gases, H <sub>2</sub> , O <sub>2</sub>	metais: Cu, Fe e outros

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- P.A.Tipler, *Física Moderna*, Rio de Janeiro: Guanabara Dois, 1981.
- M.Born, P. Auger, E. Schrödinger, W. Heisenberg, *Problemas da Física Moderna*, Coleção Debates em Física, São Paulo : Editora Perspectiva S.A., 1969.
- R.Eisenberg, R. Resnick, *Física Quântica - Átomos, moléculas, sólidos, núcleos e partículas*, São Paulo: Editora Campus, 1994.
- H. Pohl - *Introdução à Física Quântica*, São Paulo: Editora Edgard Blücher Ltda, 1973.
- H. A. Mello, R.S. Biasi - *Introdução à Física dos Semicondutores*, São Paulo: Editora Edgard Blücher Ltda, 1975.
- H. Pohl - *Introdução à Física Quântica*, São Paulo: Editora Edgard Blücher Ltda, 1973.
- R.F. Pierret - *Semiconductor Fundamentals*, Modular Series on Solid State Devices, Vol I, EUA: Addison-Wesley Publishing Company, 1989
- S. Datta - *Quantum Phenomena in Modern Solid State* , Modular Series on Solid State Devices, Vol VIII, EUA: Addison-Wesley Publishing Company, 1989

## PROBLEMAS

- 7.1- Explicar como é o preenchimento das bandas de condução e de valência e qual é a característica da banda proibida para os: (a) condutores; (b) isolantes; (c) semicondutores.
- 7.2 - Explicar o que são os sólidos moleculares, iônicos, covalentes e metálicos, dando as suas principais características, explicando-as em função do preenchimento das bandas.
- 7.3 - Explicar o princípio de atuação das ligações covalentes e metálicas e justificar a diferença que os respectivos materiais apresentam no comportamento plástico e na condutibilidade elétrica.
- 7.4 - Calcular a distância  $r_0$  entre os íons de  $K^+$  e  $Cl^-$  no KCl, admitindo que cada íon ocupa um cubo de lado  $r_0$ . O peso molecular é 74,55 g/mol e a densidade é de 1,984 g/cm<sup>3</sup>.
- 7.5 - Sabendo que a estrutura cristalina do KCl é a mesma que a do NaCl calcular a energia potencial eletrostática de atração do KCl, admitir  $r_0$  é 3,14 Å.
- 7.6 - A distância entre o Li e o Cl no LiCl é de 2,57 Å. Usar esse valor e o peso molecular de 42,4 g/mol para calcular a densidade do LiCl.
- 7.7 - Calcular a densidade de elétrons livres na prata cuja densidade é 10,5 g/ cm<sup>3</sup>, admitindo um elétrons livre por átomo.

## 8 SEMICONDUTORES

### 8.1 INTRODUÇÃO

Os materiais semicondutores podem ser constituídos por um único elemento como o Si ou o Ge ou por compostos formados pela associação de elementos da coluna III e da coluna V da tabela periódica (AlP, AlAs, AlSb, GaN, GaP, GaSb, InP, InAs, InSb) ou da coluna II e coluna VI (ZnO, ZnS, ZnSe, ZnTe, CdS, CdSe, CdTe, HgS) ou ainda podem ser ligas do tipo  $Al_xGa_{1-x}As$ ,  $GaAs_{1-x}P_x$ ,  $Hg_{1-x}Cd_xTe$  e  $Ga_xIn_{1-x}As_{1-y}P_y$ .

A figura 8.1 mostra uma parte da tabela periódica evidenciando o grupo de elementos que compõe os materiais semicondutores.

II	III	IV	V	VI
4 Be	5 B	6 C	7 N	8 O
12 Mg	13 Al	14 Si	15 P	16 S
30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se
48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te
80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po

Fig. 8.1 - Parte da tabela periódica que mostra os materiais semicondutores.

O silício foi o primeiro elemento utilizado como material semicondutor na década de 40 e de 50. Ele ainda continua sendo o material mais comum por apresentar uma série de vantagens em relação ao germânio:

- *largura da banda proibida mais adequada, 1,12 eV, em vez de 0,6 eV;*
- *faixa de temperatura de operação mais larga (até 150°C);*
- *capacidade de ser oxidado termicamente, sendo seu óxido, contrariamente ao de germânio, insolúvel em água;*
- *a abundância de matéria prima, 25,7% da crosta terrestre;*
- *menor custo para obtenção do silício em grau eletrônico, ou seja, de alta pureza;*
- *menor corrente de reversão.*

### 8.2 ELÉTRONS E BURACOS

Num semicondutor a uma temperatura próxima de zero todas as ligações estão estabelecidas, pode-se dizer que todos os elétrons estão ligados, ou seja, os elétrons são de valência. Diz-se então, que a banda de valência está completa e, como não há elétrons livres, diz-se que a banda de condução está vazia. Apesar da banda proibida (o gap) ser pequena esse material comporta-se como um isolante. À medida que a temperatura é aumentada os elétrons começam a adquirir energia suficiente para se desligarem do átomo dando origem, para cada elétron livre, a uma ligação covalente rompida ou faltante.

O elétron livre é uma carga negativa que pode migrar pelo cristal e a ligação rompida pode ser considerada como uma carga positiva, chamada buraco, que também pode migrar pelo cristal. Cada elétron que sai de uma ligação covalente indo restabelecer uma outra que estava incompleta pode ser visto como um buraco que se deslocou no sentido contrário ao do elétron. Daqui para frente o buraco será tratado como uma carga positiva móvel apesar de corresponder ao salto de diferentes elétrons movendo-se em sentido contrário a ele. Num semiconductor puro os elétrons livres e os buracos estão em números iguais porque são sempre formados aos pares. A criação desses elementos pode ser representada de duas formas diferentes, uma através do desenho da rede cristalina e outra através do esquema de bandas (figura 8.2)

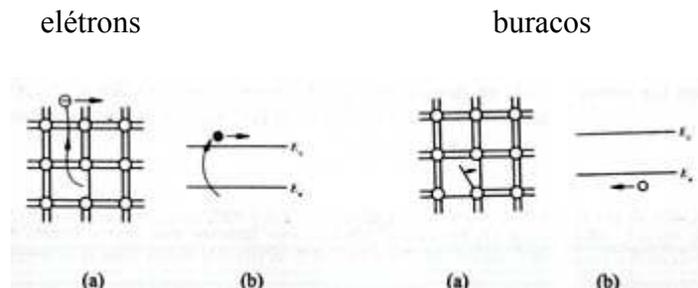


Fig. 8.2 - Representação de elétrons livres e buracos utilizando dois modelos (a) rede cristalina (b) bandas.

### 8.3 GERAÇÃO E RECOMBINAÇÃO DE PORTADORES

Os semicondutores na temperatura de 0 K apresentam todas as ligações covalentes intactas, porque não há energia disponível para produzir nenhuma ruptura. À medida que a temperatura é elevada a agitação térmica da rede produz o movimento dos átomos em torno de sua posição de equilíbrio o que vai modificando as distâncias e os ângulos entre os átomos. Parte da energia dos átomos é transferida aos elétrons possibilitando que alguns deles ganhem energia suficiente para se desligarem das ligações dando origem aos pares, elétrons livres, na banda de condução, e buracos, na banda de valência. Esse fenômeno é denominado geração térmica, e depende exclusivamente da temperatura do material.

À medida que o número de elétrons livres e de buracos aumenta, cresce também a probabilidade de ocorrer recombinação entre eles. Quando isso acontece significa que houve o restabelecimento de uma ligação covalente. Esse fenômeno dá-se com a liberação de uma certa quantidade de energia que pode ser emitida na forma de fótons ou fônons que são absorvidos pela rede. A recombinação também é função da temperatura aumentando com ela.

Em cada temperatura, após o estabelecimento do equilíbrio, o número de elétrons livres e de buracos torna-se constante, isso não significa que cessa a criação e recombinação de portadores, mas que o número de pares criados é igual ao número de pares que se recombinam. Trata-se portanto de um equilíbrio dinâmico e não de um equilíbrio estático.

Os portadores também podem ser criados pelo fornecimento, aos elétrons, de energia suficiente para que eles passem da banda de valência para a banda de condução. Essa energia pode ser fornecida através da incidência de luz. Há um processo mais complexo de geração de portadores, envolvendo a presença de centros R-G (recombinação-geração) que são defeitos da rede, por exemplo a falta de um átomo. Os centros R-G facilitam a formação de portadores pois sua presença faz com que os elétrons precisem de uma energia menor para se libertarem. Isso pode ser descrito como se esses centros criassem, com sua presença, níveis de energia na banda proibida, por isso funcionando como indutores desses processos.

## 8.4 MASSA EFETIVA

Quando se aplica um campo elétrico  $\vec{E}$  entre duas placas, no vácuo, o elétron que estiver entre elas será acelerado por uma força elétrica  $\vec{F}$  que obedece a relação abaixo:

$$\vec{F} = e\vec{E} = m_o\vec{a} \quad (8.1)$$

Essa aceleração é a que aparece quando o meio é o vácuo. Porém se, em vez de estar no vácuo, o elétron estiver num material semiconductor, encontrará em seu caminho muitos obstáculos como os átomos, outros elétrons ou defeitos e a colisão com esses elementos o desacelerará.

Após uma certa desaceleração o elétron é novamente acelerado, continuando seu caminho numa sucessão de colisões nas quais perde parte de sua energia e de acelerações nas quais ganha-a novamente. Se se quisesse descrever detalhadamente esse processo encontrar-se-iam muitas dificuldades pois trata-se de processos complexos e dependentes de muitas variáveis. Uma forma simples de descrever essa situação é imaginar que o elétron seja uma partícula, com outra massa, colocada no vácuo, portanto não sofrendo colisões mas apresentando os mesmos resultados macroscópicos que o elétron no semiconductor real apresenta. Essa partícula teria a mesma velocidade final que o elétron. A massa desse elétron imaginário é chamada massa efetiva do elétron,  $m_n^*$ . Essa é uma descrição simplificada que leva em conta somente os efeitos externos do campo elétrico aplicado a um material, sem considerar o que acontece a nível microscópico sendo bastante útil no estudo dos fenômenos internos dentro de um semiconductor.

Uma imagem análoga pode ser criada para os buracos, para eles também a massa efetiva,  $m_p^*$  é um valor fictício que dá conta da descrição de seu comportamento na presença de um campo elétrico.

É importante que fique claro que, ao se criar o conceito de massa efetiva, está se substituindo o complexo conjunto de poços de potenciais existentes dentro do material, e portanto o conjunto de campos elétricos internos, por um único campo externo.

TABELA 8.1 - RELAÇÃO ENTRE A MASSA EFETIVA E A MASSA REAL DE PORTADORES A 300 K

Material	GaAs	Si	Ge
$m_p^*/m_o$	0,52	0,81	0,36
$m_n^*/m_o$	0,066	1,18	0,55

## 8.5 SEMICONDUTOR INTRÍNSECO

É considerado semicondutor intrínseco o material puro, ou seja, aquele em que a concentração de impurezas não supera  $10^{-10} \text{ cm}^{-3}$ . Sua característica mais importante é a igualdade entre o número de portadores positivos e negativos, pois todos portadores são gerados termicamente, ou seja, aos pares, não há portadores gerados por impurezas. Serão definidas as seguintes grandezas:

$n$  = número de elétrons por centímetro cúbico

$p$  = número de buracos por centímetro cúbico

$n_i$  = número de portadores intrínsecos por centímetro cúbico

Num semicondutor intrínseco, em condições de equilíbrio, vale a igualdade entre todas essas concentrações:

$$n = p = n_i \quad (8.2)$$

damos a tabela abaixo com os valores dessa grandeza para diversos materiais:

TABELA 8.2 - CONCENTRAÇÃO DE PORTADORES INTRÍNSECOS A TEMPERATURA AMBIENTE

Material	GaAs	Si	Ge
Concentração ( $\text{cm}^{-3}$ ) = $n_i$	$2 \cdot 10^6$	$1 \cdot 10^{10}$	$22 \cdot 10^{13}$

Para se ter uma idéia da ordem de grandeza desses valores faz-se a comparação entre o número de ligações covalentes da rede (que é igual ao número de átomos normais da rede multiplicado por quatro)  $5 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3} \times 4 = 2 \cdot 10^{23} \text{ cm}^{-3}$  e o número de ligações rompidas (que é igual à concentração de portadores intrínsecos) à temperatura ambiente. Para o silício o resultado é um fator de  $2 \cdot 10^{13}$ , que indica que, à temperatura ambiente, a fração de ligações rompidas, ou seja, a fração de elétrons livres em relação ao número de elétrons presos nas ligações covalentes, é ínfimo. porém essa fração cresce exponencialmente com a temperatura.

## 8.6 SEMICONDUTOR EXTRÍNSECO

O semicondutor extrínseco é obtido através da introdução voluntária de impurezas num semicondutor intrínseco. Se a impureza introduzida for um elemento trivalente, uma das ligações covalentes, de cada átomo de impureza, ficará incompleta dando origem a um buraco. No momento em que um elétron da rede vier completar essa ligação ter-se-á um buraco em movimento e um átomo (o da impureza) ionizado positivamente. Semelhantemente, quando uma impureza pentavalente for introduzida, será criado um elétron livre e um íon negativo (o átomo de impureza sem um de seus elétrons).

Assim, a introdução de impurezas num material puro altera o número de portadores modificando a igualdade entre a quantidade de elétrons livres e de buracos existentes no material intrínseco. As impurezas trivalentes, que geram buracos, são denominadas aceitadoras e as pentavalentes, que geram elétrons livres, doadoras. A tabela 8.3 dá uma relação de impurezas comumente usadas na dopagem do silício.

TABELA 8.3 - TIPOS DE IMPUREZAS COMUNEMENTE UTILIZADAS COMO DOPANTES NO SILÍCIO

	Doadores	Aceitadores
Impurezas	P (o mais usado), As, Sb	Boro (o mais usado), Ga, In, Al

Os doadores são elementos da coluna V da tabela periódica e os elementos aceitadores são da coluna III.

O quinto elétron da impureza doadora fica mais “solto” que os outros quatro elétrons da última camada que participam das ligações covalentes, isso significa que ele tem uma menor energia de ligação. Esse valor pode ser grosseiramente calculado supondo que o átomo e os quatro elétrons da última camada formam um “núcleo” positivo de carga  $+e$  circundado pelo quinto elétron da última camada. Para essa situação pode-se usar o modelo do átomo de hidrogênio corrigindo a permissividade do vácuo  $\epsilon_0$  para a permissividade do silício  $\epsilon$ , correção essa realizada multiplicando  $\epsilon_0$  pela constante dielétrica do silício  $\kappa_s (=12)$ , e substituindo a massa do elétron pela sua massa efetiva dentro do silício. Com esse método, denominado “pseudo” átomo de hidrogênio, e empregando a fórmula corrigida dada abaixo (8.3) foram conseguidos bons resultados, próximos aos reais, que estão na tabela 8.4.

$$E_B = - \frac{\left( \frac{m^* e^4}{n} \right)}{2 \left( 4\pi\kappa_s \epsilon_0 \hbar \right)^2} \quad (8.3)$$

TABELA 8.4 - ENERGIAS DE LIGAÇÃO  $E_B$  DO ÚLTIMO ELÉTRON DE DIVERSAS IMPUREZAS

Impureza doadora		Impureza aceitadora	
Sb	0,039 eV	B	0,045 eV
P	0,045 eV	Al	0,067 eV
As	0,054 eV	Ga	0,072 eV
		In	0,16 eV

O fato de ser possível arrancar um elétron de um átomo de impureza gastando só alguns centésimos de eV, quando normalmente é preciso fornecer uma energia de 1,12eV (a energia do gap) para arrancá-lo de uma ligação covalente entre dois átomos de silício, pode ser representado, no modelo de banda, por um nível permitido dentro da banda proibida. Diz-se então que a impureza doadora cria níveis no “gap” proibido, próximos à base da banda de condução.

De modo análogo, é possível dar origem a um buraco próximo a uma impureza aceitadora gastando muito menos energia que para a criação desse buraco no material puro. Justifica-se esse comportamento dizendo que as impurezas criam níveis de energia, dentro do “gap” proibido, próximos ao topo da banda de valência. Uma representação desses fatos pode ser vista na figura 8.3.

A ocupação desses níveis depende da temperatura, crescendo com seu aumento, esse comportamento está esquematizado na figura 8.4. para impurezas doadoras e aceitadoras.

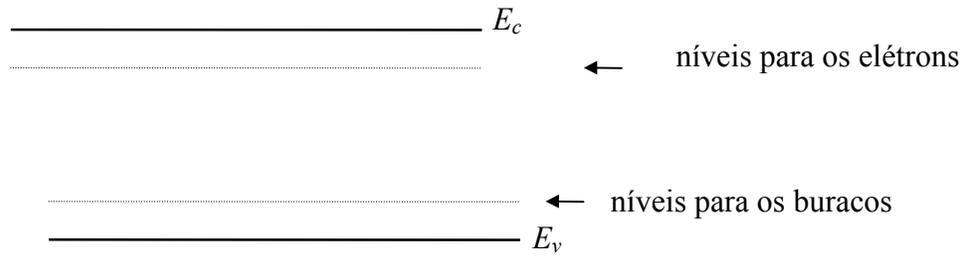


Fig. 8.3 - Modelo de banda mostrando os níveis criados pelas impurezas no “gap”

O material que for dopado com impurezas doadoras terá um excesso de elétrons livres e portanto seus portadores majoritários serão negativos, então ele será denominado tipo *N*. Analogamente, o material dopado com impurezas aceitadoras será chamado de tipo *P*.

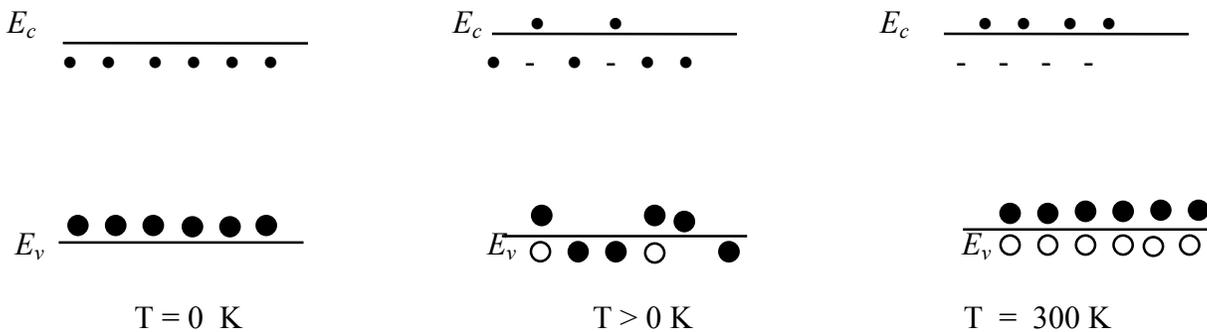


Fig. 8.4 - Visualização da ação da temperatura na ocupação dos níveis dentro do “gap”

## 8.7 DENSIDADE DE ESTADOS

Chegou-se a um ponto em que é preciso definir quantitativamente o comportamento dos portadores dentro de um semiconductor. Já foi dito que o número de estados permitidos em cada banda é quatro vezes o número de átomo porque cada átomo fornece quatro elétrons, que devem ocupar níveis diferentes por causa do princípio de exclusão de Pauli. Agora precisa-se de uma equação que descreva como esses estados estão distribuídos em função da energia, ou seja, precisa-se da densidade de estados. Cálculos envolvendo considerações quânticas levam aos seguintes resultados:

$$g_n(E) = m_n^* \frac{\left[2m_n^*(E - E_c)\right]^{1/2}}{\pi^2 \hbar^3} \quad \text{para } E > E_c \quad (8.4)$$

$$g_p(E) = m_p^* \frac{\left[2m_p^*(E_v - E)\right]^{1/2}}{\pi^2 \hbar^3} \quad \text{para } E < E_v \quad (8.5)$$

onde  $g_n(E)$  e  $g_p(E)$  informam quantos estados com energia  $E$  há na banda de condução e de valência respectivamente. Se for feita uma analogia comparando os estados dos elétrons a cadeiras da arquibancada de um campo de futebol, podemos dizer que  $g_n(E)$  nos dá o número de cadeiras existentes na fila  $E$ , com a diferença que, no caso do estádio,  $E$  é uma variável discreta e, no caso da rede cristalina,  $E$  é uma variável praticamente contínua.

Como o significado de  $g_n(E)$  é o de uma densidade, o produto  $g_n(E) dE$  representa o número de estados existentes, por  $\text{cm}^3$ , na banda de condução, entre a energia  $E$  e  $E + dE$ , se  $E > E_c$ . Analogamente o produto  $g_p(E) dE$  representa o número de estados existentes, por  $\text{cm}^3$ , na banda de condução, entre a energia  $E$  e  $E + dE$ , se  $E < E_v$ .

O gráfico apresentado na figura 8.5 mostra que na banda proibida não há estados permitidos pois  $g_n(E)$  e  $g_p(E)$  não são definidos nessa faixa. No topo da banda de valência, quando  $E = E_v$ , e na base da banda de condução, para  $E = E_c$ , a densidade de estados ainda é nula, porém à medida que se aumenta  $E$ , na banda de condução (é o mesmo que subir nessa banda), ou se diminui  $E$  na banda de valência (descer nessa banda) a densidade de estados aumenta rapidamente.

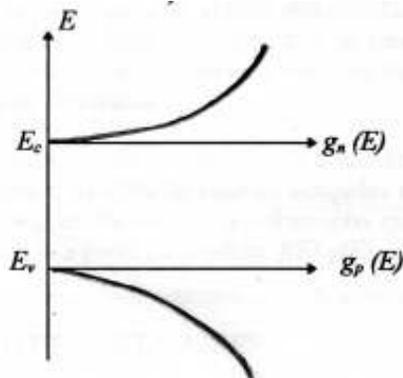


Fig. 8.5 - Gráfico das densidades de estados  $g_p$  e  $g_c$  em função de  $E$

## 8.8 FUNÇÃO DE DISTRIBUIÇÃO DE FERMI

Agora temos uma situação à qual deverá ser aplicada a estatística de Fermi-Dirac: os elétrons livres da banda de condução e os buracos da banda de valência de um semiconductor. A equação (6.8), escrita abaixo, é a equação do fator de ocupação dos portadores e a figura 8.6 representa esse fator para a temperatura de 0 K e para uma temperatura mais alta.

$$f(E) = \frac{1}{e^{(E-E_F)/kT} + 1} \quad (6.8)$$

Analisando-se essa expressão podem-se observar diversos fatos:

- para  $E = E_F$   $f(E) = 1/2$ , por definição;
- para  $T = 0$  K,  $f(E) = 1$  para  $E < E_F$  e  $f(E) = 0$  para  $E > E_F$ ;

- à medida que  $T$  cresce, para valores de  $E$  próximos de  $E_F$ , (digamos  $|E - E_F| < 3kT$ ), o comportamento de  $f(E)$  altera-se porque o termo  $e^{(E-E_F)/kT}$  não é desprezível, nem é muito maior que 1. Fora da faixa de  $(E_F - 3kT)$  a  $(E_F + 3kT)$  o comportamento de  $f(E)$  permanece o mesmo. Nessa faixa,  $f(E)$  comporta-se exponencialmente como mostra a figura (8.6)
- assim como  $f(E)$  descreve a probabilidade de ocupação dos estados pelos elétrons,  $[1 - f(E)]$  descreve a probabilidade de ocupação dos estados pelos buracos.

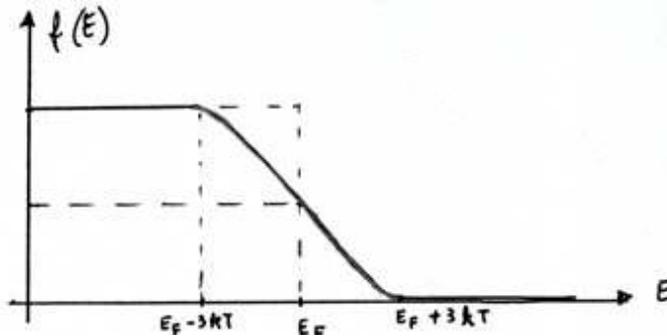


Fig. 8.6 - Esquema da função de ocupação da estatística de Fermi, para temperatura  $T = 0\text{K}$  (---)  $T > 0\text{K}$  (-)

É importante que não se pense que esse gráfico significa que os níveis energéticos em torno de  $E_F$  estão sendo ocupados, significa somente que, se eles existissem, poderiam ser ocupados, mas as expressões de  $g_p$  e de  $g_n$  nos dizem que, nessa região, não há estados permitidos, ou seja, não é possível a ocupação de estados.

Voltando à analogia com o estádio de futebol,  $f(E)$  nos diz que as cadeiras da terceira fila, por exemplo, tem probabilidade de 25% de estarem ocupadas e a função  $g(E)$  nos diz quantas cadeiras há na terceira fila. Percebe-se que a informação que tem sentido físico, o número de cadeiras ocupadas, é obtido a partir do produto  $f(E) \cdot g(E)$ .

## 8.9 DISTRIBUIÇÃO DE PORTADORES

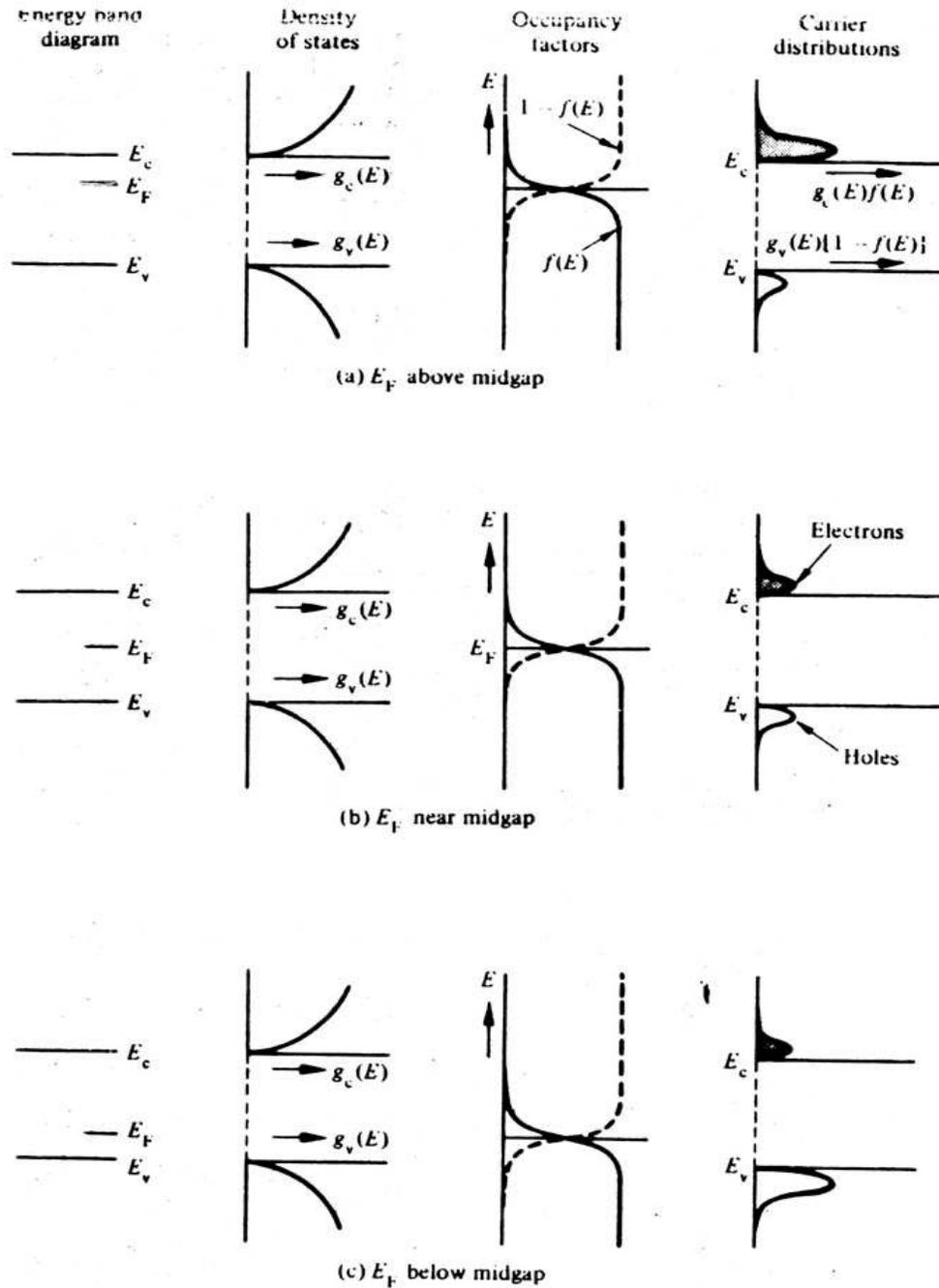
Como foi dito no capítulo anterior o número de elétrons na banda de condução, ou seja, os que ocupam estados na banda de condução, pode ser obtido pela integração do produto  $f(E) \cdot g_n(E) dE$  ao longo da banda. Raciocínio análogo vale para os buracos na banda de valência assim:

$$n = \int_{E_c}^{E_{topo}} f(E) \cdot g_n(E) \cdot dE \quad (8.6)$$

$$p = \int_{E_{base}}^{E_v} [1 - f(E)] \cdot g_p(E) \cdot dE \quad (8.7)$$

A figura 8.7. é um resumo do que foi dito pois apresenta os gráficos da densidade de estados,  $g(E)$ , do fator de ocupação,  $f(E)$ , e da distribuição de portadores,  $g(E) \cdot f(E)$ , para três posições diferentes do nível de Fermi: próximo do topo da banda de valência, no meio do gap e próximo à base da banda de condução. Os números totais de portadores,  $n$  e  $p$ , são numericamente iguais às áreas das curvas que aparecem na quarta coluna da figura 8.7.

Note-se que dependendo da posição do nível de Fermi  $n$  é maior que  $p$  (tipo  $N$ ) ou vice-versa (tipo  $P$ ). Fig. 8.7 –



Densidade de estados,  $g_p$  e  $g_n$ , fator de ocupação,  $f(E)$ , e distribuição de portadores  $g(E).f(E)$ , para três posições diferentes do nível de Fermi: próximo do topo da banda de valência, no meio do gap e próximo à base da banda de condução.

## 8.10 NEUTRALIDADE DE CARGA

Os semicondutores são modificados adicionando-se ao material original, que é neutro, impurezas, também neutras, e isto deve apresentar como resultado uma carga elétrica total nula. As cargas presentes no material são constituídas pelos elétrons livres, pelos buracos da banda de valência e pelos íons que surgem com a ionização das impurezas. Pode-se considerar que, na temperatura ambiente, todas as impurezas estão ionizadas então o número de íons, por elas geradas por unidade de volume, é igual à sua concentração.

Assim a densidade de carga pode ser dada pela expressão:

$$\rho = q \cdot p - q \cdot n + qN_D - q \cdot N_A \quad (8.8)$$

onde  $N_A$  é a concentração de impurezas aceitadoras e  $N_D$  a concentração de impurezas doadoras. A partir dessa expressão gera-se a condição de neutralidade de carga:

$$\boxed{p - n + N_D - N_A = 0} \quad (8.9)$$

A partir dessa condição podem ser obtidas expressões para  $p$  e  $n$ , expressões essas que serão válidas somente se o semiconductor não for degenerado (a definição que será dada mais adiante) e se a temperatura for tal que as impurezas estão totalmente ionizadas, de modo que a concentração de íons é igual à concentração de impurezas.

## 8.11 CONCENTRAÇÃO DE PORTADORES

As equações (8.6) e (8.7) permitem a determinação da concentração de ambos os tipos de portadores. Substituindo-se as expressões de  $f(E)$  e de  $g(E)$  e fazendo-se a integral chega-se aos seguintes resultados:

$$n = N_c e^{(E_F - E_C)/kT} \quad (8.10)$$

$$p = N_v e^{(E_V - E_F)/kT} \quad (8.11)$$

onde

$$N_c = 2 \left( \frac{2\pi m_n^* kT}{h^2} \right)^{3/2} \quad \text{e} \quad N_v = 2 \left( \frac{2\pi m_p^* kT}{h^2} \right)^{3/2} \quad (8.12)$$

Estas expressões foram deduzidas considerando-se o nível de Fermi restrito à seguinte condição:  $(E_V + 3kT) < E_F < (E_C - 3kT)$ , ou seja, o nível de Fermi está no gap porém não muito próximo nem do topo da banda de condução nem da base da banda de valência. Essa condição, quando obedecida garante que o semiconductor não é degenerado.

Pode ser interessante determinar as expressões de  $n$  e de  $p$  em função de outras variáveis mais práticas como  $E_F$ ,  $E_i$  (nível de Fermi do semiconductor intrínseco) e  $n_i$  (concentração de portadores intrínsecos). Lembrando que num semiconductor intrínseco  $n = p = n_i$ , e que, por definição, o nível de Fermi é igual a  $E_i$ , as equações (8.10) e (8.11) podem ser rescritas do seguinte modo:

$$n_i = N_c e^{(E_i - E_C)/kT} \quad (8.13)$$

$$n_i = N_v e^{(E_V - E_i)/kT} \quad (8.14)$$

Obtendo-se as expressões:  $N_c = n_i e^{(E_C - E_i)/kT}$  e  $N_v = n_i e^{(E_i - E_V)/kT}$  que substituídas nas equações (8.10) e (8.11) dão:

$$\boxed{n = n_i e^{(E_F - E_i)/kT}} \quad (8.15)$$

$$\boxed{p = n_i e^{(E_i - E_F)/kT}} \quad (8.16)$$

Aqui continuam sendo necessárias as condições que o semiconductor não seja degenerado, e que as impurezas estejam ionizadas.

Fazendo o produto de  $n$  por  $p$  chega-se a uma expressão muito importante:

$$\boxed{n \cdot p = n_i^2} \quad (8.17)$$

Essa expressão é muito cômoda porque nos permite fazer uma avaliação da concentração de um tipo de portadores a partir da concentração do outro.

Outras expressões para a concentração de portadores podem ser obtidas a partir da equação (8.17) isolando-se  $p = n_i^2 / n$  e substituindo-o na expressão (8.9):

$$\frac{n_i^2}{n} - n + N_D - N_A = 0 \quad (8.18)$$

que é uma equação do segundo grau em  $n$  e pode ser rescrita como:

$$n^2 - n(N_D - N_A) - n_i^2 = 0 \quad (8.19)$$

cujas soluções são:

$$\boxed{n = \frac{(N_D - N_A)}{2} + \left[ \left( \frac{N_D - N_A}{2} \right)^2 + n_i^2 \right]^{1/2}} \quad (8.20)$$

analogamente deduz-se:

$$\boxed{p = \frac{(N_A - N_D)}{2} + \left[ \left( \frac{N_A - N_D}{2} \right)^2 + n_i^2 \right]^{1/2}} \quad (8.21)$$

Para essa dedução só foram consideradas as raízes positivas porque não há sentido, fisicamente, em concentrações negativas de portadores.

## 8.12 CASOS PARTICULARES

A adoção de valores especiais para a concentração de impurezas permite, através das equações (8.20) e (8.21), o estudo de diversos casos particulares:

- Semiconductor intrínseco - não é dopado, então  $N_A = N_D = 0$ . Obtém-se:  $n = p = n_i$ , que é exatamente a característica desse tipo de semiconductor;

- Semicondutor dopado predominantemente com tipo de impurezas doadoras  $N_D - N_A \sim N_D \gg n_i^2$  ou  $N_A - N_D \sim N_A \gg n_i^2$

Geralmente a ordem de grandeza de  $n_i$  é  $10^{10} \text{ cm}^{-3}$  e a ordem das impurezas usadas como dopantes é superior a  $10^{14} \text{ cm}^{-3}$ . Usando esses valores constata-se que a concentração de portadores foi gerada principalmente pela presença de impurezas (portadores extrínsecos), logo, usando a (8.17), pode-se considerar que:

$$\begin{array}{llll} \text{para tipo } N & n \sim N_D & \text{e} & p \sim n_i^2 / N_D \\ \text{para tipo } P & p \sim N_A & \text{e} & n \sim n_i^2 / N_A \end{array}$$

- Semicondutor dopado com os dois tipos de impurezas, ambos com concentrações semelhantes -  $n_i \gg |N_D - N_A|$ ; isto se dá à medida que a temperatura aumenta e então  $n_i$  cresce exponencialmente com  $T$ . O resultado então será:

$$n \sim p \sim n_i$$

- Semicondutor compensado, aquele no qual a concentração dos dois tipos de impurezas é aproximadamente igual -  $|N_D - N_A| = 0$ . Nesse caso apesar de ser dopado, o semicondutor comporta-se como intrínseco :  $n \sim p \sim n_i$ .

### 8.13 DETERMINAÇÃO DE $E_F$

O nível de Fermi pode estar mais próximo de uma banda ou de outra dependendo da concentração de dopantes introduzida. Como já definido,  $E_i$  é o nível do centro do gap, e é igual ao nível de Fermi no semicondutor intrínseco. Inicialmente determinar-se-á a posição de  $E_F$  para o semicondutor intrínseco e depois para os outros tipos de semicondutores.

- Semicondutor Intrínseco

$n = p$  o que implica, a partir das equações (8.10) e (8.10), em:

$$N_C e^{(E_i - E_C) / kT} = N_V e^{(E_V - E_i) / kT} \quad (8.22)$$

resolvendo para  $E_i$  vem:

$$E_i = \left( \frac{E_C + E_V}{2} \right) + \frac{kT}{2} \ln \left( \frac{N_V}{N_C} \right) \quad (8.23)$$

mas como pode ser obtido a partir das equações (8.12):

$$\left( \frac{N_V}{N_C} \right) = \left( \frac{m_p^*}{m_n^*} \right)^{3/2} \quad (8.24)$$

obtém-se :

$$\boxed{E_i = \left( \frac{E_C + E_V}{2} \right) + \frac{3kT}{4} \ln \left( \frac{m_p^*}{m_n^*} \right)} \quad (8.25)$$

pode-se observar que se as massas efetivas dos elétrons e dos buracos forem iguais,  $E_f$  estará exatamente no centro do gap proibido, senão haverá um deslocamento em  $E_f$  introduzido pelo fator  $m_p^*/m_n^*$ . No caso do silício, à temperatura ambiente, o desvio em relação à posição média será de -0.0073 eV, desprezível diante da largura do gap, 1,12 eV.

- Semicondutor Extrínseco

A posição do nível de Fermi para semicondutores dopados pode ser obtida a partir das expressões (8.15) e (8.16) :

$$E_F - E_i = kT \ln\left(\frac{n}{n_i}\right) = -kT \ln\left(\frac{p}{n_i}\right) \quad (8.26)$$

para os casos particulares de materiais dopados predominantemente com um tipo de impurezas, doadoras ou aceitadoras, as equações genéricas (8.26) podem ser escritas como:

$$E_F - E_i = kT \ln\left(\frac{N_D}{n_i}\right) \quad \text{para semicondutor tipo } N \quad (8.27)$$

$$E_i - E_F = kT \ln\left(\frac{N_A}{n_i}\right) \quad \text{para semicondutor tipo } P \quad (8.28)$$

À medida que  $N_D$  aumenta,  $E_F$  afasta-se do meio do gap e aproxima-se da banda de condução até que quando  $\ln(N_D/n_i)$  é da ordem de 3 o semicondutor torna-se degenerado e essas expressões já não descrevem corretamente o comportamento do material. Analogamente, quando se aumenta  $N_A$ ,  $E_F$  aproxima-se da banda de valência. Esse comportamento é evidenciado pelo diagrama de bandas da figura 8.8.

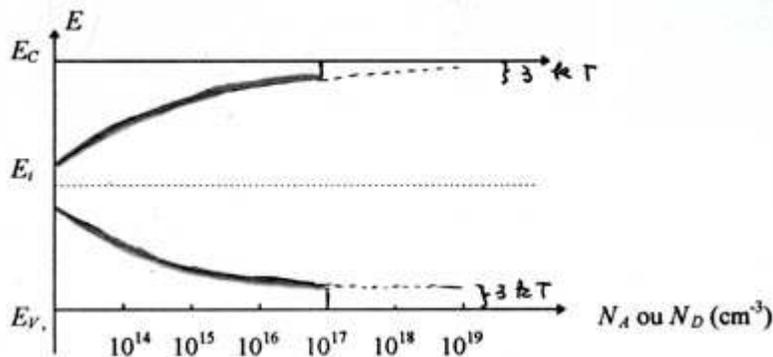


Fig. 8.8 - Diagrama de bandas, do silício, à temperatura ambiente, com o nível de Fermi variando em função da concentração de impurezas, supondo-se  $n_i = 10^{10} \text{ cm}^{-3}$

## 8.14 DEPENDÊNCIA DOS PORTADORES COM A TEMPERATURA

Podemos considerar que num semiconductor há dois tipos de portadores:

- aqueles originados termicamente, aos pares, pela ruptura das ligações covalentes e
- aqueles gerados pela ionização dos átomos de impurezas, sendo positivos ou negativos conforme o tipo de impureza.

Será analisado agora o comportamento do silício dopado à medida que se aumenta a temperatura. Na temperatura de 0K todas as ligações estão intactas e quase não há portadores; na faixa de temperatura de 0K até 100K a energia térmica é suficiente para ionizar os átomos de impurezas dando origem aos portadores que estavam fracamente ligados; na faixa de 100K até 450K (região extrínseca) o número de portadores fica razoavelmente constante e igual a  $N_A$  ou  $N_D$  conforme o tipo de impureza; acima de 450K (região intrínseca) há novamente um aumento do número de portadores pois a energia térmica presente é suficiente para romper as ligações covalente e gerar os portadores intrínsecos. Esse comportamento pode ser melhor compreendido através do gráfico abaixo que mostra a variação de  $n/N_D$  em função da temperatura, figura 8.9. Essa mesma figura mostra a descrição desse mesmo fenômeno usando a representação de bandas.

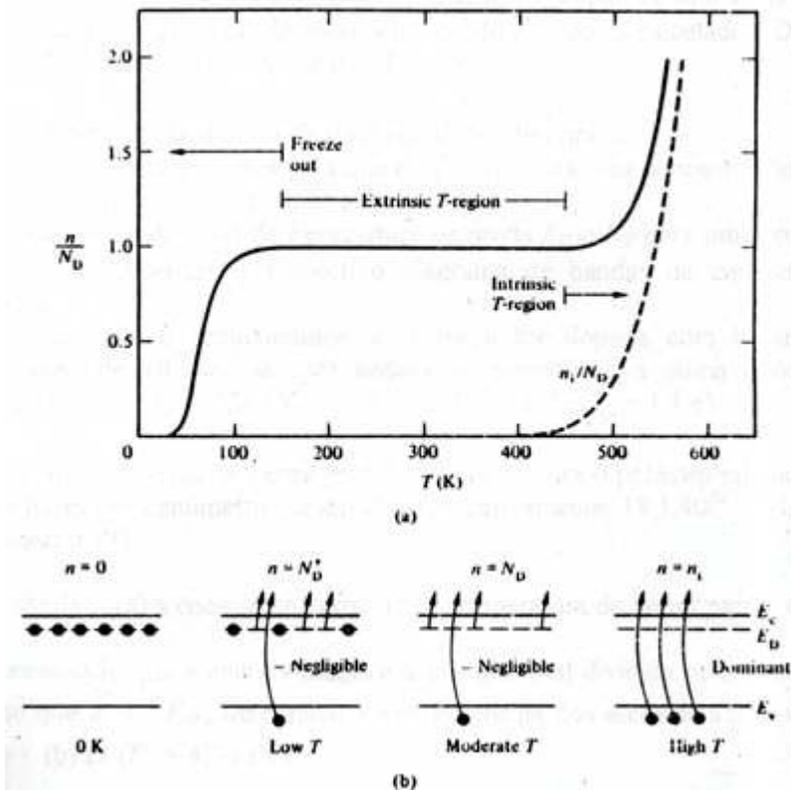


Fig. 8.9. (a) Dependência típica da concentração de portadores majoritários num semiconductor dopado em função da temperatura. (b) explicação do mesmo comportamento usando o modelo de bandas.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- R. Eisenberg, R. Resnick, *Física Quântica - Átomos, moléculas, sólidos, núcleos e partículas*, São Paulo: Editora Campus, 1994.  
H. Pohl - *Introdução à Física Quântica*, São Paulo: Editora Edgard Blücher Ltda, 1973.  
H. A. Mello, R.S. Biasi - *Introdução à Física dos Semicondutores*, São Paulo: Editora Edgard Blücher Ltda, 1975.  
R.F. Pierret - *Semiconductor Fundamentals*, Modular Series on Solid State Devices, Vol I, EUA: Addison-Wesley Publishing Company, 1989  
S. Datta - *Quantum Phenomena in Modern Solid State*, Modular Series on Solid State Devices, Vol VIII, EUA: Addison-Wesley Publishing Company, 1989

## PROBLEMAS

- 8.1.- Explicar detalhadamente o que são semicondutores tipo p e tipo n.
- 8.2. -Definir semicondutor extrínseco.
- 8.3.- Definir o processo de geração e recombinação térmica de portadores.
- 8.4 - Considerando uma barra de silício intrínseca qualquer, determinar a posição exata do nível de Fermi entre  $E_C$  e  $E_V$  para uma concentração de dopantes tipo P de  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$ . Desenhar o respectivo digrama de faixas de energia indicando os valores calculados. Dados:  
 $n_i = 1,54 \cdot 10^{10}$   $kT = 0,26 \text{ eV}$   $E_g = 1,1 \text{ eV}$ .
- 8.5. - Considerando uma barra de silício qualquer determinar:  
a) a concentração de dopantes para que esta barra tenha uma concentração de elétrons de  $10^{15} \text{ cm}^{-3}$ . Dizer que dopante deve ser utilizado.  
b) a posição exata do nível de Fermi entre os níveis  $E_C$  e  $E_V$  para uma concentração de dopantes de  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$ . Desenhar o respectivo diagrama de bandas de energia indicando os valores calculados.  
(c) que tipo será o semicondutor se a barra for dopada com impurezas trivalentes numa concentração de  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$  e com impurezas pentavalentes numa concentração de  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$ . Justificar. Dados:  $kT = 0,026 \text{ eV}$   $n_i = 1,45 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$  e  $E_G = 1,1 \text{ eV}$
- 8.6. - Calcular a energia de Fermi para o alumínio e para o potássio sabendo que as densidades de elétrons livres por centímetro cúbico são, respectivamente,  $18,1 \cdot 10^{22}$  e  $1,4 \cdot 10^{22}$ . (Sugestão: usar a expressão 6.13).
- 8.7. - Calcular : (a) a energia de Fermi; (b) a temperatura de Fermi para o ouro a  $T = 0 \text{ K}$ .
- 8.8 - Lembrando que a energia média é a energia total dividida pelo número de partículas e que prova-se que  $\bar{E} = \frac{1}{3} E_F$ , determinar a energia média dos elétrons a  $T = 0 \text{ K}$  no (a) cobre ( $E_F = 7,03 \text{ eV}$ ) (b) Li ( $E_F = 4,74 \text{ eV}$ ).

## 9 TRANSPORTE DE CARGAS

### 9.1 INTRODUÇÃO

Até agora estudou-se o comportamento de partículas em “repouso”, ou em equilíbrio e, nesse caso, não há correntes elétricas ou fluxos de cargas.

Toda perturbação gera um desequilíbrio que pode levar à criação de uma corrente elétrica. Pode-se citar como perturbações geradoras de movimento de cargas dentro de uma amostra:

- - o aumento de sua temperatura
- - a existência de um gradiente de concentração dentro dela e
- - a aplicação de um campo elétrico em suas extremidades.

Essas perturbações geram movimento de partículas no sentido de restabelecer o equilíbrio rompido. Muitas vezes acontece mais de um desses processos simultaneamente.

### 9.2 AGITAÇÃO TÉRMICA

Partículas do tipo elétrons e buracos movimentam-se continuamente dentro da rede cristalina de acordo com a temperatura da amostra. Quanto maior a temperatura maior sua mobilidade. Esse movimento é aleatório mudando de direção a cada colisão da partícula com a rede. Quando não existe um fator que determina uma direção preferencial, como um gradiente de concentração, por exemplo, o deslocamento médio da partícula após um tempo relativamente longo é nulo porque os deslocamentos num sentido são igualmente prováveis que aqueles no sentido oposto. Ao se observar os movimentos gerados por outras causas dever-se-á lembrar que sempre a agitação térmica estará presente adicionada aos outros processos, apesar de não alterar o deslocamento efetivo das partículas.

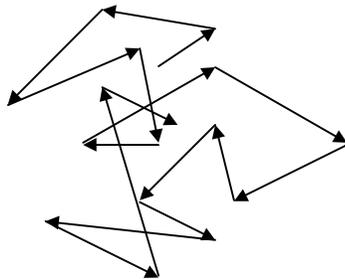


Fig. 9.1 - Movimento aleatório das partículas causado por agitação térmica

### 9.3 DIFUSÃO

Sempre que houver uma distribuição não uniforme de partículas e essas partículas tiverem liberdade de movimento elas se espalharão de modo a uniformizar sua concentração em toda a região. Como exemplo prático podemos lembrar que algum tempo após abrir um vidro de perfume num ambiente fechado, ele poderá ser sentido em qualquer ponto da sala. Outro exemplo é o que acontece quando se joga uma gota de tinta dentro de um copo de água, após algum tempo ela está espalhada de modo uniforme na água. Esse comportamento é descrito pela segunda lei de Fick:

$$J = -D \frac{\partial C(x,t)}{\partial x} \quad (9.1)$$

que diz que o fluxo  $J$  gerado por um gradiente de concentração ao longo de  $x$ ,  $\frac{\partial C}{\partial x}$ , é proporcional a esse gradiente e no sentido dos pontos de maior, para os pontos de menor, concentração.

Um modo de visualizar que essa uniformização acontece é imaginar quatro caixas uma ao lado da outra, havendo 1024 partículas na primeira caixa e nenhuma nas outras. Considere-se que metade dessas partículas se movem para a caixa da direita e metade para a caixa da esquerda, se de algum lado houver uma parede rígida as partículas são rebatidas e voltam para a caixa onde estavam. A fig. 9.2 mostra como, com o passar do tempo, a distribuição vai se homogeneizando.

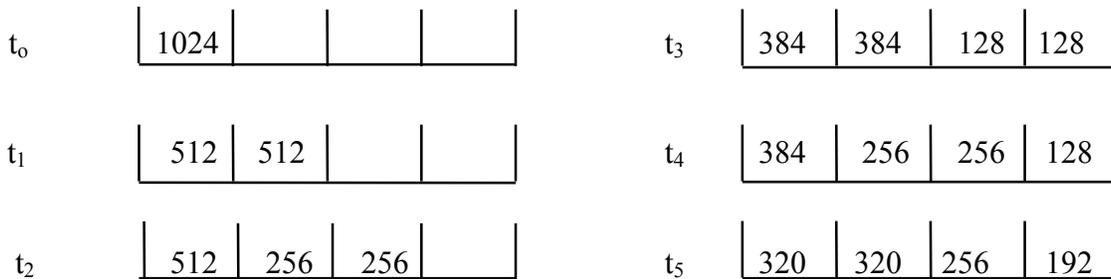


Fig. 9.2 - Distribuição de partículas dentro de quatro caixas ao longo do tempo

No caso de semicondutores, se em algum momento houver maior concentração de portadores num ponto do que em outro, isso dará origem a uma corrente de difusão, cujo objetivo é o de uniformizar a concentração desses portadores ao longo do material. Essa difusão implica no movimento de cargas e consequentemente no aparecimento de correntes elétricas.

Imagine-se um semiconductor tipo  $P$  com uma concentração não uniforme de buracos, como mostra a figura 9.3 (a). Afim de alcançar uma uniformização da concentração definida pela lei de Fick, os buracos vão se movimentar para a direita dando origem a uma corrente de difusão  $J_{dif p}$ , da esquerda para a direita. Uma situação semelhante de concentração de elétrons dará origem a um fluxo da esquerda para a direita, o que significa uma corrente elétrica convencional em sentido contrário porque os portadores são negativos, fig. 9.3 (b). Para que ocorra difusão é preciso que o gradiente de concentração não seja nulo, ou  $\Delta p \neq 0$  e  $\Delta n \neq 0$ . Quanto maior for o gradiente maior será o fluxo de portadores e portanto a corrente.

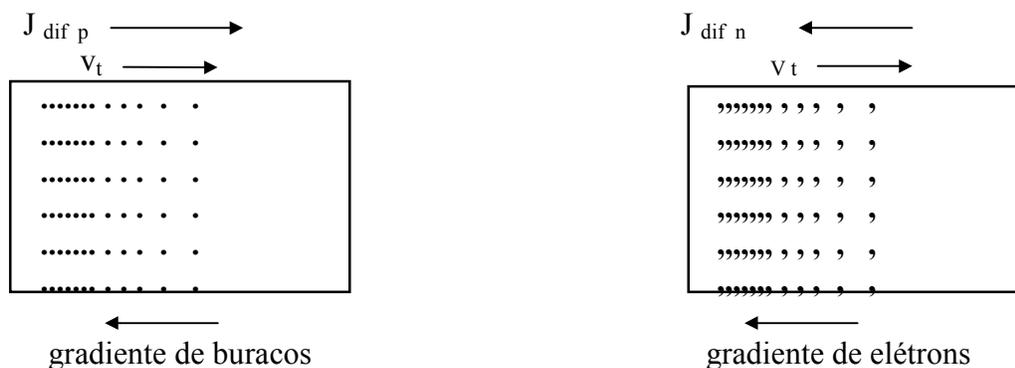


Fig. 9.3 - (a) corrente de buracos e (b) corrente de elétrons

Deseja-se agora calcular uma expressão para a corrente de difusão. Para tanto imagine-se uma superfície de área  $A$ , com concentração de portadores igual a  $n_0$  equidistante de duas superfícies, a da esquerda com concentração  $n_2$  e a da direita com concentração  $n_1$  de portadores do mesmo tipo. Admite-se que a distância entre a superfície central e as laterais é igual a  $d$ , o livre caminho médio. Como livre caminho médio é a distância média entre duas colisões consecutivas, em média, as partículas não deverão sofrer colisões no trajeto até a superfície central. Considerando a velocidade das partículas igual a  $v_t$  e levando em conta que as partículas da superfície 1 se dividem igualmente para a esquerda e para a direita, podemos dizer que o número de partículas vindas da superfície 1 que alcançam a superfície central, durante o intervalo de tempo  $\tau$ , é o número das partículas contidas no cilindro de comprimento  $v_t \tau$  e seção transversal  $A$ , e portanto igual a:  $(n_1 v_t \tau A)/2$ . Analogamente o número das que alcançam a superfície  $A$  vindas da superfície 2 são  $(n_2 v_t \tau A)/2$ . Assim podemos dizer que o número resultante efetivo de partículas que atravessam  $A$  é igual a diferença desses dois valores, já que as partículas vindas da esquerda tem sentido contrário àquelas vindas da direita (fig 9.4), ou seja, o número líquido de partículas que atravessa a superfície  $A$ , por unidade de tempo e por unidade de área é

$$S = \frac{v_t (n_2 - n_1)}{2} \quad (9.2)$$

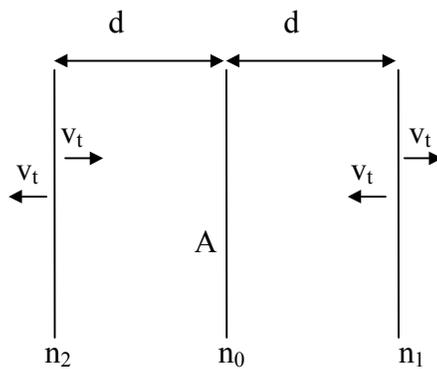


Fig. 9.4 - Fluxo de partículas numa região com gradiente de concentração

A variação da concentração de partículas ao longo do eixo  $x$  pode ser descrita através das seguintes expressões:

$$n_1 = n_0 + d \frac{\partial n}{\partial x} \quad (9.3)$$

$$n_2 = n_0 - d \frac{\partial n}{\partial x} \quad (9.4)$$

Substituindo-se as (9.3) e (9.4) na (9.1) obtém-se

$$S = -d v_t \frac{\partial n}{\partial x}$$

Lembrando que a densidade de corrente elétrica ( $J$ ) é o fluxo de cargas e que cada portador tem carga  $q$  obtém-se:

$$J = -q d v_t \frac{\partial n}{\partial x}$$

Essa expressão pode ser reescrita para cada tipo de portador:

$$J_p = -qD_p \frac{\partial p}{\partial x} \quad (\text{buracos}) \quad \text{e} \quad J_n = qD_n \frac{\partial n}{\partial x} \quad (\text{elétrons}) \quad (9.5)$$

$$\text{onde} \quad D_p = d \cdot v_{tp} \quad \text{e} \quad D_n = d \cdot v_{tn} \quad (9.6)$$

são os coeficientes de difusão dos portadores positivos e negativos respectivamente.

Considerando uma situação em que ocorra a difusão dos dois tipos de portadores a corrente de difusão total gerada será:

$$J_{dif} = -qD_p \frac{\partial p}{\partial x} + qD_n \frac{\partial n}{\partial x} \quad (9.7)$$

## 9.4 DERIVA

A deriva é o movimento de partículas carregadas em resposta a um campo elétrico aplicado.

Imagine-se que uma diferença de potencial é aplicada às extremidades de uma amostra de material semiconductor. As cargas internas se movimentam de acordo com seu sinal:

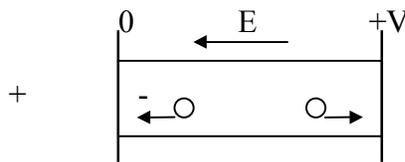
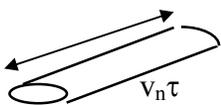


Fig. 9.5 - Correntes de deriva de buracos e elétrons

Para obter uma expressão da corrente de deriva consideremos os portadores que estão num cilindro de área  $A$  e comprimento  $v_n \tau$  (figura 9.6), após um tempo  $\tau$  todos os portadores terão chegado à extremidade do cilindro. Sendo  $n$  a concentração de portadores negativos por unidade de volume



será  $q v_n n$ .

número de portadores existentes no cilindro será  $A v_n \tau n$   
o número de portadores que atravessam a extremidade  $A$   
no intervalo de tempo  $\tau$  será  $A v_n n$   
a quantidade de carga que chega à extremidade  $A$  por  
segundo, por unidade de área, ou seja, a corrente de deriva

Fig. 9.6 - Portadores contidos no cilindro de área  $A$

A partir da última expressão é possível obter a densidade de corrente,  $J$ :

$$\frac{I}{A} = \vec{J}$$

que aplicada a cada tipo de portador gera:

$$\vec{J}_n = -qn\vec{v}_n \quad \vec{J}_p = +qp\vec{v}_p \quad (9.8)$$

Quando houver os dois tipos de portadores, a corrente de deriva total pode ser obtida pela soma dessas expressões:

$$\vec{J}_{der} = \vec{J}_n + \vec{J}_p = -qn\vec{v}_n + qp\vec{v}_p \quad (9.9)$$

## 9.5 MOBILIDADE

No caso de correntes de deriva observa-se que, para pequenos valores de campo elétrico aplicado, a velocidade dos portadores é proporcional ao campo elétrico. Essa observação permite escrever:

$$\vec{v}_n = -\mu_n \vec{\mathcal{E}} \quad \vec{v}_p = \mu_p \vec{\mathcal{E}} \quad (9.10)$$

onde  $\mu_n$  e  $\mu_p$  são as constantes de proporcionalidade chamadas de mobilidade dos portadores negativos e positivos respectivamente.

Para se ter uma idéia da ordem de grandeza desse parâmetro apresentamos a seguir a tabela 9.1 referente a diferentes amostras na temperatura de 300K:

TABELA 9.1. - MOBILIDADE DE ELÉTRONS E BURACOS EM SEMICONDUTORES, NA TEMPERATURA DE 300K

Material	$\mu_n$ (cm <sup>2</sup> /V s)	$\mu_p$ (cm <sup>2</sup> /V.s)
Silício dopado com $N_D = 10^{14}/\text{cm}^3$	1360	
Silício dopado com $N_A = 10^{14}/\text{cm}^3$		460
GaAs dopado com $N_D = 10^{15}/\text{cm}^3$	8000	
GaAs dopado com $N_A = 10^{15}/\text{cm}^3$		320

### 9.5.1 Dependência da mobilidade com a dopagem

A mobilidade dos portadores, a partir de um certo valor da concentração de impurezas, decresce com o aumento da concentração de impurezas, como pode ser observado na figura 9.7. O comportamento da mobilidade dos elétrons e dos buracos, nesse aspecto é semelhante, apesar que, em termos absolutos, a mobilidade dos elétrons é maior. Quando a concentração de dopagem é baixa, menor que  $10^{15}/\text{cm}^3$ , a mobilidade independe da dopagem, porque sua influência é desprezível diante da contribuição do espalhamento criado pela rede. Porém, à medida que ela aumenta a mobilidade diminui. Este fato ocorre porque as impurezas funcionam como centros perturbadores aumentando o espalhamento térmico, produzido pela vibração dos átomos da rede, e contribuindo para dificultar o movimento das partículas, ou seja, para diminuir sua mobilidade.

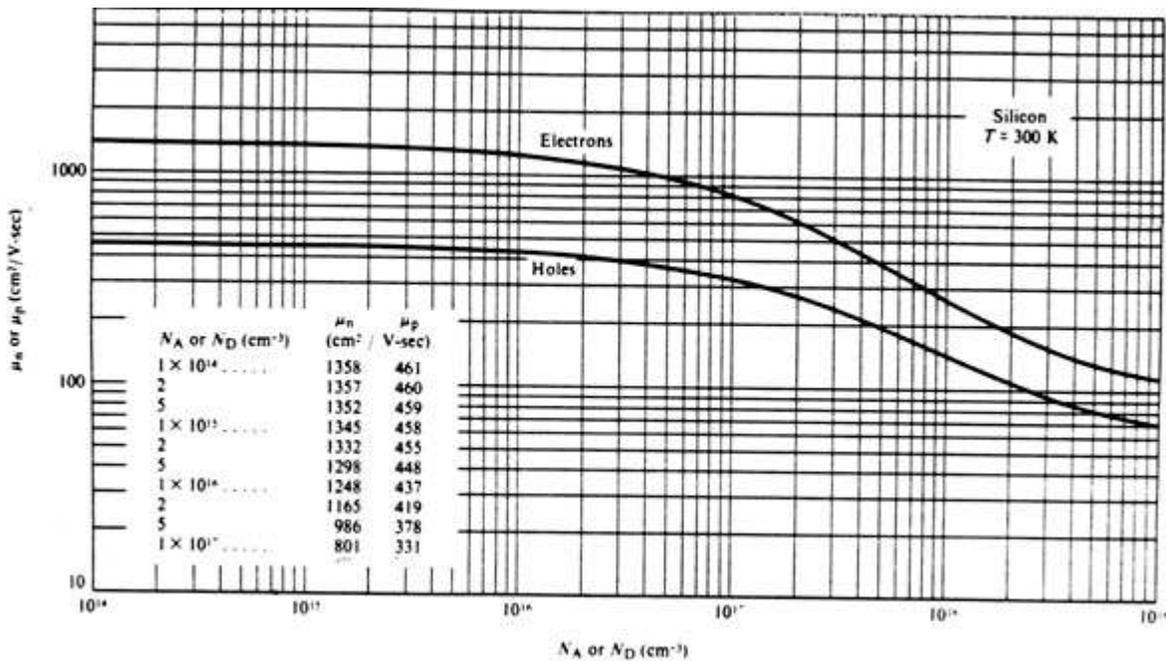


Fig. 9.7. - Comportamento da mobilidade dos portadores no silício, em função a concentração do dopante,  $\mu_n$  refere-se a elétrons e  $\mu_p$  refere-se a buracos

### 9.5.2 Dependência da mobilidade com a temperatura

A importância do efeito da temperatura depende da concentração de dopagem. Para dopagem em pequenas concentrações a mobilidade é muito influenciada pela temperatura. Nesse caso, quanto maior a temperatura menor a mobilidade. Na faixa de temperaturas entre 200 e 500 K a mobilidade varia com  $T^{-2,2}$ .

A dependência da mobilidade com a dopagem e a temperatura pode ser observada no gráfico da figura 9.8. Ele evidencia que tanto o aumento de impurezas como o aumento de temperatura diminui a mobilidade e que a influência da temperatura é mais marcante para baixas concentrações de impurezas. Comportamento semelhante ocorre com os buracos.

A expressão (9.9) da corrente de deriva pode ser reescrita usando as equações (9.10):

$$\vec{J}_{der} = qn\mu_n \vec{\varepsilon} + qp\mu_p \vec{\varepsilon} \quad (9.11)$$

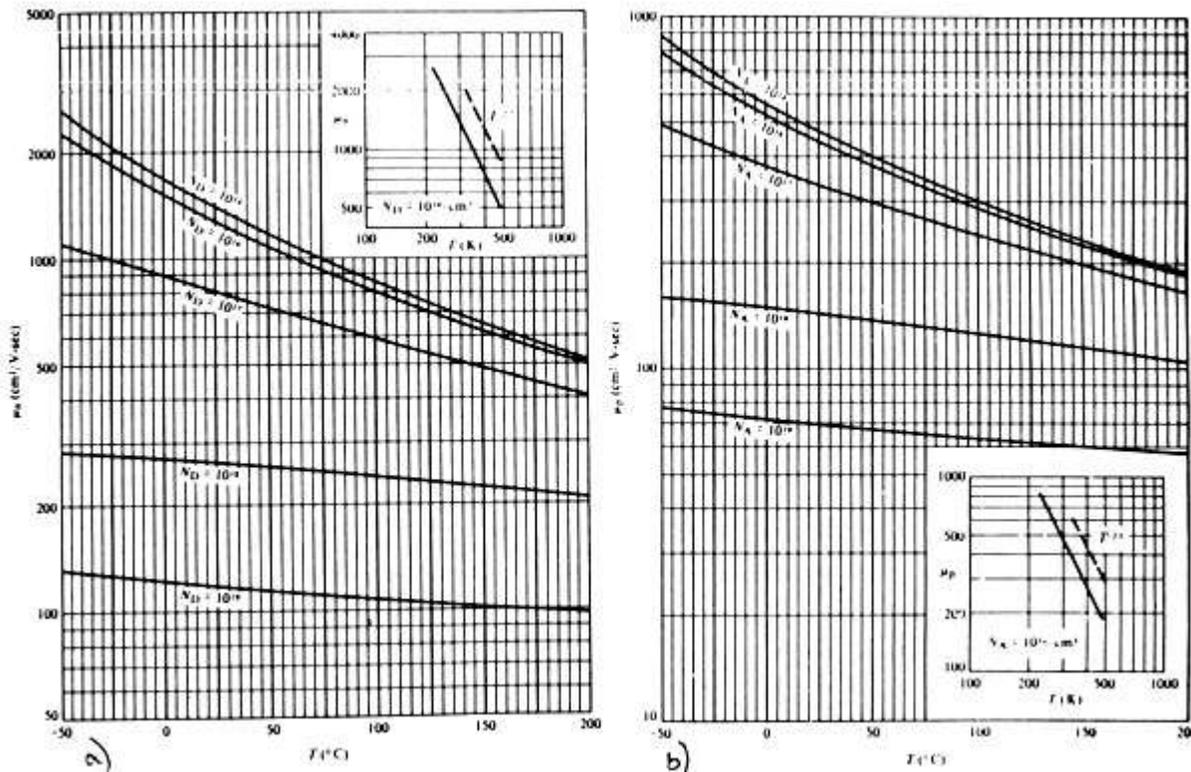


Fig. 9.8. Dependência da mobilidade dos elétrons (a) e dos buracos (b) em função da temperatura para uma amostra de silício dopado com diferentes concentrações de impurezas.

## 9.6 RESISTIVIDADE

O comportamento elétrico de um material pode ser descrito através de sua resistividade. Ela relaciona entre si o campo elétrico aplicado e a densidade de corrente elétrica resultante, ou seja, a causa ao efeito. A resistividade,  $\rho$ , cuja unidade é (ohm.m), é o inverso da condutividade,  $\sigma$ , que é expressa em unidades de (mho/m). Formalmente tem-se as seguintes expressões:

$$\vec{\varepsilon} = \rho \vec{J} \quad \rho = \frac{1}{\sigma} \quad (9.12)$$

que possibilitam obter, a partir da expressão (9.11), uma nova expressão para a resistividade:

$$\rho = \frac{1}{q(n\mu_n + p\mu_p)} \quad (9.13)$$

Pode-se examinar como esta equação fica para alguns casos particulares.

Para um semicondutor tipo n,  $N_D \gg N_A$  e  $N_D \gg n_i$  então  $n \cong N_D$  e  $p \cong 0$  o que leva a:

$$\rho = \frac{1}{qN_D \mu_n} \quad (9.14)$$

do mesmo modo para um semicondutor tipo p,  $N_A \gg N_D$  e  $N_A \gg n_i$  então  $p \cong N_A$  e  $n \cong 0$  o que leva a:

$$\rho = \frac{1}{qN_A \mu_p} \quad (9.15)$$

Essas expressões são válidas somente se for obedecida a condição do semicondutor não ser degenerado.

A determinação da resistividade é um processo relativamente simples. Essa medida permite, através das equações acima, vir a conhecer o valor da velocidade de deriva dos diferentes tipos de portadores.

## 9.7 EFEITO HALL

Hall realizou uma experiência que permitiu descobrir qual é o tipo de portador responsável pela condução numa lâmina submetida a uma diferença de potencial. Além de permitir descobrir o sinal das cargas majoritárias num semicondutor essa experiência também permite determinar o número de portadores por unidade de volume, ela será apresentada em seguida.

Considere-se uma lâmina fina de um semicondutor, dopado, com espessura  $h$ . Aplica-se uma diferença de potencial entre a extremidade esquerda e a direita de modo a produzir uma corrente elétrica  $i$ , indicada na figura 9.9. Essa corrente tanto pode ser produzido por cargas positivas que se movem da esquerda para a direita como por cargas negativas que se movem da direita para a esquerda. Aqui será descrito o caso de elétrons. A lâmina é imersa num campo magnético, como indicado na figura, o que faz surgir uma força para cima atuando sobre os elétrons. Por causa dessa força os elétrons deslocam-se para a superfície superior da lâmina, criando aí um acúmulo de cargas negativas em relação à superfície inferior. Essa diferença de cargas dá origem a um campo elétrico  $\varepsilon$  para cima que gera uma força para baixo que procura compensar o efeito do campo magnético. A situação de equilíbrio ocorre quando a força elétrica for igual à magnética:

$qvB = q\varepsilon$  e nesse caso as superfícies superior e inferior estarão submetidas a uma diferença de potencial, chamada de voltagem de Hall, que vale:

$$V_H = \varepsilon h = vBh \quad (9.16)$$

Se em vez de elétrons os portadores fossem constituídos de buracos o potencial da superfície de cima seria positivo em relação à superfície inferior.

A determinação da polaridade de  $V_H$  permite conhecer o sinal dos portadores majoritários. A sua medida permite determinar, através da equação (9.16), o valor da velocidade de arrastamento,  $v$ . A medida de  $i$  fornece o valor da densidade de corrente  $J$  e usando-se uma das expressões (9.8) pode-se obter o valor da densidade volumétrica de portadores,  $n$ .

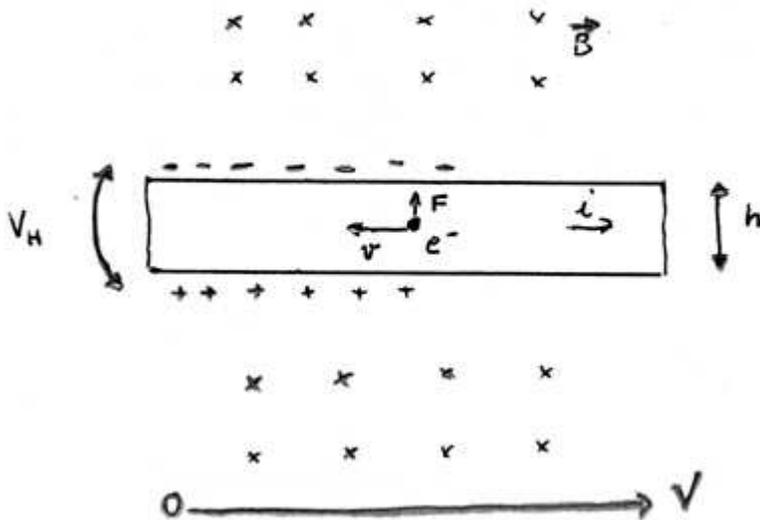


Fig. 9.9. Montagem experimental para determinação de efeito Hall, no caso em que os elétrons são os portadores majoritários.

### 9.8 ENTORTAMENTO DAS BANDAS

O diagrama de energias dos portadores dentro de um semiconductor pode ser analisado relacionando-o com as energias:  $E_v$  do topo da bandas de valência e  $E_c$  da base da banda de condução.

Consideremos uma ligação covalente cujo elétron ocupa um estado do topo da banda de valência. Se a esse elétron for dada uma energia  $E_G$  (igual a largura do gap proibido) ele pulará para a banda de condução dando origem ao par: um elétron com energia  $E_c$  e um buraco com energia  $E_v$ , ambos sem velocidade. Se porém a energia fornecida for superior a  $E_G$ , a energia do elétron será superior a  $E_c$  e a do buraco será inferior a  $E_v$ , o que significa que ambos terão alguma energia cinética. Assim pode-se dizer que a energia cinética do elétron é  $E - E_c$  e que a do buraco é  $E - E_v$  (figura 9.9).

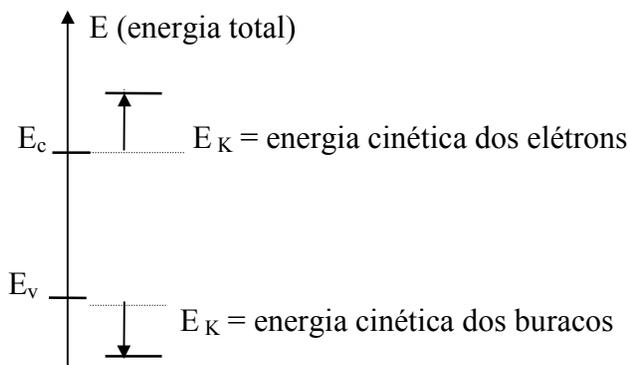


Fig. 9.9- Diagrama de bandas de energia

Usando um nível qualquer como nível de referência para o potencial nulo e lembrando que a energia total é a soma da cinética e da potencial, pode-se completar o diagrama assinalando a energia potencial e a energia total de um elétron na banda de condução e de um buraco na banda de valência.

È preciso lembrar que  $E_{ref}$  é arbitrário e pode ser escolhido convenientemente.

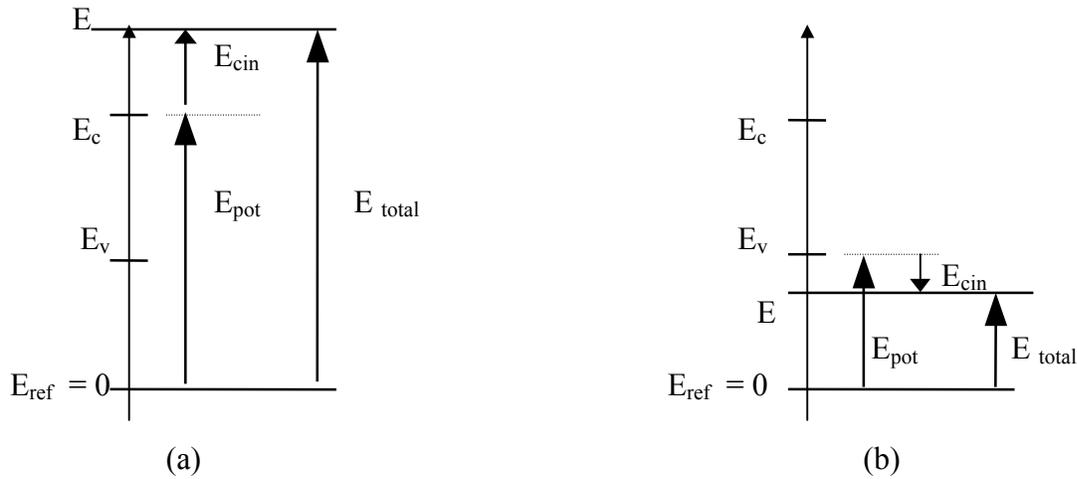


Fig. 9.10 - Diagrama de bandas de energia evidenciando a energia potencial, a energia cinética e a energia total dos portadores : (a) elétrons (b) buracos

Considere-se agora um semiconductor sujeito a um único elemento perturbador: um campo elétrico sem a presença de campo magnético, de “stress” ou de gradiente térmico. O efeito do campo elétrico será o de mudar a energia potencial dos portadores. Se o campo elétrico for produzido por uma diferença de potencial  $V$  pode-se dizer que ele gera uma energia potencial  $E_p = -qV$  que por definição também é igual a  $E_c - E_{ref}$ , ou seja:

$$E_{pot} = -qV \quad E_{pot} = E_c - E_{ref}$$

o que nos permite obter:

$$V = -\frac{(E_{ref} - E_c)}{q} \quad (9.16)$$

O campo elétrico tem como efeito alterar o diagrama de energias dos portadores, e pode ser obtido a partir da seguinte equação:

$$\vec{\varepsilon} = -\nabla U \quad (9.17)$$

onde  $\vec{\varepsilon}$  é o campo elétrico e  $\nabla U$  é o gradiente do potencial aplicado ao semiconductor.

Observando que há um gradiente de potencial aplicado ao longo do eixo de  $x$ , pode-se relacionar o campo elétrico com a alteração que ele provoca nos níveis  $E_c$ ,  $E_v$  e  $E_{ref}$ , através das seguintes expressões:

$$\boxed{\vec{\varepsilon} = \frac{1}{q} \frac{dE_c}{dx}} \quad \boxed{\vec{\varepsilon} = \frac{1}{q} \frac{dE_v}{dx}} \quad \boxed{\vec{\varepsilon} = \frac{1}{q} \frac{dE_{ref}}{dx}} \quad (9.18)$$

Essas equações dizem que um campo elétrico presente dentro de um material semiconductor provoca o entortamento das bandas de condução e de valência do mesmo modo que provoca o entortamento do nível de referência para o potencial. Esse entortamento é causado pelo gradiente de potencial existente na região que, por sua vez, é gerado pelo campo elétrico.

O mesmo efeito é obtido tanto pela imposição de uma diferença de potencial quanto pela aplicação de um campo elétrico.

## 9.9 JUNÇÃO PN

Quando se justapõe dois materiais dopados, respectivamente, com impurezas aceitadoras e doadoras, ocorrem transformações na região próxima à junção porque os portadores e suas concentrações diferem. Em seguida estudar-se-ão esses fenômenos.

Um material dopado é neutro porque, tanto os átomos que o formam, quanto aqueles usados na dopagem, são neutros. Porém, apesar de neutros, os átomos das impurezas tem, no núcleo e na eletrosfera, uma carga elétrica diferente dos átomos da rede e portanto, ao substituí-los, provocam alterações nas ligações covalentes com seus vizinhos.

Um átomo trivalente numa rede de silício, por exemplo, só pode estabelecer três pares de ligação covalente porque tem um elétron a menos, esse fato dá origem à criação de um buraco. Assim, uma impureza trivalente pode ser encarada como um núcleo negativo com uma carga positiva a sua volta, quando essa carga positiva (o buraco) recebe energia suficiente para migrar surgem um portador positivo e um íon negativo na rede.

Comportamento análogo ocorre com as impurezas pentavalentes: cada impureza dá origem à formação de um portador negativo (um elétron) e de um íon positivo.

Assim as impurezas podem ser vistas como núcleos negativos com eletrosfera positiva, no caso de impurezas trivalentes, e como núcleos positivos e eletrosfera negativa, no caso de impurezas pentavalentes, como indicado na figura 9.11.

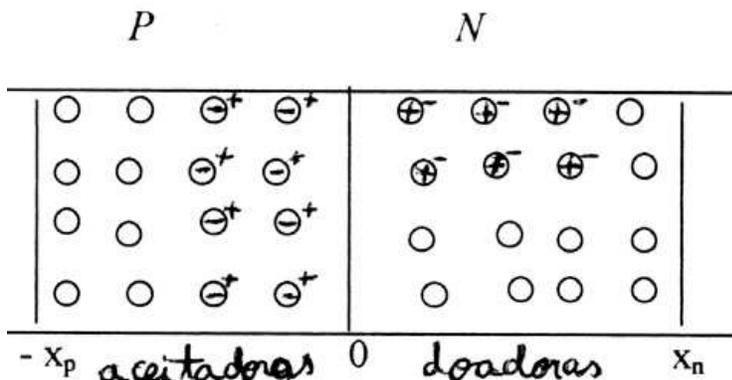


Fig.9.11 - Junção PN mostrando as diferenças entre os átomos das impurezas e os átomos da rede.

Essa configuração é aquela que ocorre no instante da junção porém ela começa a mudar imediatamente após a sua formação. A presença de elétrons, em maior número do lado direito e de buracos em maior número do lado esquerdo cria gradientes de concentração que provocam uma movimentação de cargas no sentido de tentar restabelecer uma uniformidade de distribuição de portadores. Esses gradientes porém não conseguem provocar o movimento dos íons, que estão presos na rede, o que dá origem a um campo elétrico, no caso, no sentido da direita para a esquerda. Esse campo elétrico, que cresce a medida que a migração dos buracos e elétrons aumenta, provoca um potencial elétrico que impede a difusão dos elétrons para a esquerda e dos buracos para a direita. Após um certo tempo estabelece-se novo equilíbrio com a criação, entre as regiões P e N, de uma região onde há um campo elétrico presente, chamada região de depleção.

Essa região é uma transição entre as regiões  $P$  e  $N$  que permanecem inalteradas.

Na região de depleção a distribuição de cargas ou portadores não é uniforme, e como consequência aparece um campo elétrico que gera uma diferença de potencial. Essa diferença, por sua vez, provoca o entortamento das bandas de condução e de valência.

O campo elétrico gerado por uma distribuição de cargas não uniforme é dado pela expressão:

$$\varepsilon = \frac{1}{\kappa_s \varepsilon_0} \int_{-\infty}^x \rho(x) dx \quad (9.19)$$

onde  $\kappa_s$  é a constante dielétrica relativa ao material, no caso do silício vale 11,8,  $\varepsilon_0$  é a permissividade do vácuo e

$$\rho(x) = (-n + p + N_D - N_A)q \quad (9.20)$$

é a densidade total volumétrica de carga.

A partir dessas expressões pode-se escrever a equação genérica chamada Equação de Poisson :

$$\frac{d\varepsilon}{dx} = \frac{q}{\kappa_s \varepsilon_0} (-n + p + N_D - N_A) \quad (9.21)$$

A solução dessa equação é complexa pois os valores de  $n$  e de  $p$  dependem do valor do campo elétrico,  $\bar{\varepsilon}$ , que é desconhecido, então é interessante fazer algumas aproximações válidas na região de depleção para simplificar o problema.

### 9.9.1 Aproximação de depleção

Como foi dito, a equação de Poisson pode ser resolvida facilmente fazendo-se algumas aproximações aceitáveis na região de depleção. Uma dessas aproximações é, basicamente considerar a concentração de portadores intrínsecos móveis (de  $n$  e de  $p$ ) pequena comparada com a concentração de íons de impurezas doadoras e aceitadoras. Como os resultados obtidos com essa aproximação foram confirmados experimentalmente, ela é aceitável.

Serão examinadas separadamente as duas partes da região de depleção:

a) para  $-x_p \leq x \leq 0$  (fig. 9.11)  $N_A \gg n_p$  e  $N_A \gg p_p$  região  $P$

onde  $n_p$  é a concentração de elétrons e  $p_p$  a concentração de buracos na região  $P$ .

b) para  $0 \leq x \leq x_n$   $N_D \gg n_n$  e  $N_D \gg p_n$  região  $N$

onde  $n_n$  é a concentração de elétrons e  $p_n$  a concentração de buracos na região  $N$ .

c) para  $x \leq -x_p$  e  $x \geq x_n$  carga total é nula no restante do material

Rescrevendo a equação (9.21) de Poisson:

$$\text{para } -x_p \leq x \leq 0 \quad \frac{d\varepsilon}{dx} = \frac{-qN_A}{\kappa_s \varepsilon_0}$$

$$\text{para } 0 \leq x \leq x_n \quad \frac{d\varepsilon}{dx} = \frac{qN_D}{\kappa_s \varepsilon_0}$$

$$\text{e para } x \leq -x_p \text{ e } x \geq x_n \quad \bar{\varepsilon} = 0$$

Integrando-se essas equações e lembrando-se que  $\varepsilon(-x_p) = \varepsilon(x_n) = 0$  que é uma condição de contorno, obtém-se:

$$\varepsilon = - \int_{-x_p}^x \frac{qN_A}{\kappa_s \varepsilon_0} dx = - \frac{qN_A}{\kappa_s \varepsilon_0} (x + x_p) \quad \text{para } -x_p \leq x \leq 0 \quad (9.21)$$

$$\varepsilon = \int_x^{x_n} \frac{qN_D}{\kappa_s \varepsilon_0} dx = - \frac{qN_D}{\kappa_s \varepsilon_0} (x_n - x) \quad \text{para } 0 \leq x \leq x_n \quad (9.22)$$

Essas duas expressões devem ter o mesmo valor para  $x = 0$ ,

$$\text{o que significa que: } - \frac{qN_A}{\kappa_s \varepsilon_0} x_p = - \frac{qN_D}{\kappa_s \varepsilon_0} x_n \quad \text{donde se obtém:}$$

$$\boxed{N_A x_p = N_D x_n} \quad (9.23)$$

essa importante expressão evidencia que a carga total deve ser igual nos dois lados da junção, porém a largura da região de depleção depende inversamente da concentração de impurezas, ou seja, só é igual nos dois lados da junção, se as concentrações das dopagens também forem,  $N_A = N_D$ . Em caso contrário, quanto maior a concentração de dopantes menor será a largura da região de depleção naquele tipo de semiconductor.

## 9.9.2 Potencial de difusão

A distribuição não uniforme de cargas gera um potencial que pode ser obtido a partir da expressão:

$$\bar{\varepsilon} = - \frac{dV}{dx} \quad (9.24)$$

Usando-se as expressões (9.21) e (9.22) de  $\bar{\varepsilon}$ , já deduzidas, e fazendo a integral separadamente nas duas partes da região de depleção tem-se:

$$V = \int_0^{V(x)} dV = - \int_{-x_p}^x \left[ - \frac{qN_A}{\kappa_s \varepsilon_0} (x + x_p) \right] dx = \frac{qN_A}{\kappa_s \varepsilon_0} \left( \frac{x^2}{2} + xx_p \right) \Big|_{-x_p}^x$$

$$V = \frac{qN_A}{\kappa_s \epsilon_0} (x + x_p)^2 \quad \text{para} \quad -x_p \leq x \leq 0 \quad (9.25)$$

Repetindo para  $0 \leq x \leq x_n$  obtém-se:

$$V = \int_V^{V_0} dV = \int_x^{x_n} \left[ \frac{qN_D}{\kappa_s \epsilon_0} (x_n - x) \right] dx = \frac{qN_D}{\kappa_s \epsilon_0} \left( x_n x - \frac{x^2}{2} \right) \Big|_x^{x_n} = \frac{qN_D}{2\kappa_s \epsilon_0} (x_n - x)^2$$

$$V = V_0 - \frac{qN_D}{2\kappa_s \epsilon_0} (x_n - x)^2 \quad \text{para} \quad 0 \leq x \leq x_n \quad (9.26)$$

Impondo novamente as condições de contorno obtém-se que, para  $x = x_n$ ,  $V = V_0$ .

É possível observar que o comportamento de  $V_0$  é uma imagem especular do comportamento das bandas de energia  $E_C$ ,  $E_V$  e  $E_i$ . Enquanto as bandas entortam para baixo o potencial entorta para cima, ao se passar do tipo  $P$  para o tipo  $N$ .

O potencial de difusão,  $V_0$ , pode ser relacionado de outra com as características do semiconductor usando-se o diagrama de energia onde se pode observar que  $qV_0$  representa o entortamento das bandas e, portanto, é igual à soma da diferença de potencial entre o energia do nível intrínseco e o nível de Fermi no lado  $P$  e no lado  $N$ .

Isto pode ser escrito formalmente do seguinte modo:

$$(E_F - E_i) = kT \ln\left(\frac{n}{n_i}\right) \quad \text{do lado } N$$

$$(E_i - E_F) = kT \ln\left(\frac{p}{n_i}\right) \quad \text{do lado } P$$

Está se procurando  $V_0$  e sabendo que

$$qV_0 = (E_F - E_i)_{\text{lado } N} + (E_i - E_F)_{\text{lado } P}$$

pode-se obter:

$$V_0 = \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{n p}{n_i^2}\right) \quad (9.30)$$

Lembrando que podem ser feitas algumas aproximações para se determinar a concentração de portadores adota-se que  $n_n \cong N_D$  do lado  $N$ , e  $p_p \cong N_A$  do lado  $P$ , ambos longe da junção e obtém-se a expressão final para

o potencial de difusão:

$$\boxed{V_0 = \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{N_D N_A}{n_i^2}\right)} \quad (9.31)$$

A determinação do potencial de difusão, também chamado de potencial interno, é importante pois ela dá diretamente informações sobre o entortamento da banda e indiretamente sobre a alteração da energia cinética e potencial dos portadores que ocorre numa junção.

### 9.9.3 Largura da região de depleção

Para se determinar a largura da região de depleção impõe-se às equações (9.25) e (9.26) a condição de contorno no ponto  $x = 0$ . Sendo a função potencial contínua:

$$V_{x=0} = V_0 \quad \frac{qN_A x_p^2}{2\kappa_s \varepsilon_0} = V_0 - \frac{qN_D x_n^2}{2\kappa_s \varepsilon_0}$$

pode-se obter uma expressão de  $x_p$  a partir da expressão (9.23) e ao substituí-la na expressão anterior consegue-se uma equação que dá o valor de  $x_n$ .

$$\frac{qN_A N_D^2 x_n^2}{2\kappa_s \varepsilon_0 N_A^2} = V_0 - \frac{qN_D x_n^2}{2\kappa_s \varepsilon_0} \quad \boxed{x_n = \left(\frac{2\kappa_s \varepsilon_0 N_A V_0}{N_D (N_A + N_D)}\right)^{1/2}} \quad (9.27)$$

analogamente é possível obter uma expressão para  $x_p$

$$\boxed{x_p = \left(\frac{2\kappa_s \varepsilon_0 N_D V_0}{N_A (N_A + N_D)}\right)^{1/2}} \quad (9.28)$$

Somando-se esses valores é possível obter a largura total da região de depleção:

$$W = x_n - (-x_p) = \left(\frac{2\kappa_s \varepsilon_0 N_D V_0}{qN_A (N_A + N_D)}\right)^{1/2} + \left(\frac{2\kappa_s \varepsilon_0 N_A V_0}{qN_D (N_A + N_D)}\right)^{1/2} =$$

$$\boxed{W = \left[\frac{2\kappa_s \varepsilon_0 V_0}{q(N_A + N_D)}\right]^{1/2} \left[\left(\frac{N_A}{N_D}\right)^{1/2} + \left(\frac{N_D}{N_A}\right)^{1/2}\right]} \quad (9.29)$$

A largura da região de depleção é determinada pela constante dielétrica,  $\kappa_s$ , do material, pelo potencial  $V_0$  e pela concentração de impurezas.

Se em vez de usar a aproximação de depleção os cálculos tivessem sido feitos por integração numérica os resultados seriam um pouco diferentes como pode ser observado pelas linhas tracejadas nos gráficos se são apresentados a seguir.

### 9.9.4 Gráficos

A título de ilustração daremos em seguida os gráficos da densidade de carga, do campo elétrico, do potencial e do diagrama das bandas para o caso de se ter uma junção com as seguintes concentrações:  $N_A=10^{16} \text{ cm}^{-3}$  e  $N_D=10^{17} \text{ cm}^{-3}$ .

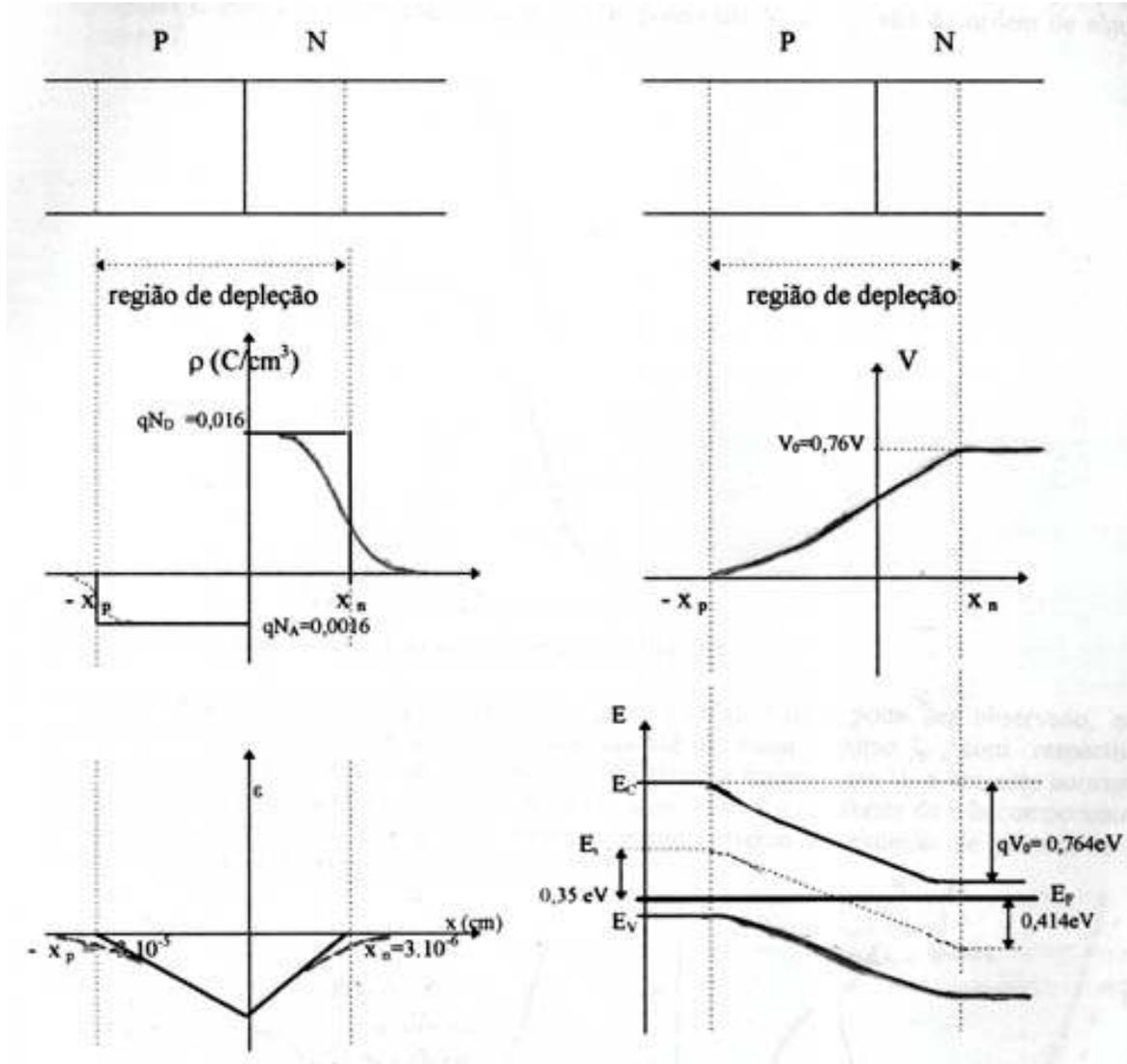


Fig. 9.13 . Gráficos típicos da densidade de carga, campo elétrico, potencial elétrico e o diagrama de bandas de energia de uma junção PN.

..... junção não abrupta.

## 9.10 UMA APLICAÇÃO: O DIODO TÚNEL

O diodo túnel é constituído de uma junção PN em que os lado P e N são fortemente dopados (degeneradamente). Com isto, tem-se uma região de depleção extremamente fina, da ordem de 100 Å ou menos, o que é consideravelmente menor do que uma junção PN convencional.

Por causa da dopagem degenerada, o nível de Fermi dos materiais P e N estará posicionado na região interna às bandas de condução e de valência como é mostrado na figura 9.14, que representa o diagrama de bandas de energia. Os potenciais  $V_p$  e  $V_n$  são da ordem de alguns poucos  $kT$ .

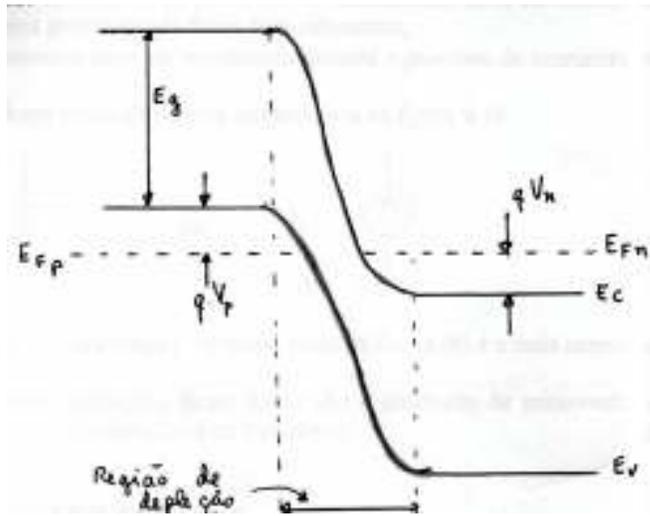


Fig. 9.14. Diagrama de bandas de energia de um diodo túnel

A curva característica está representada na figura 9.15(a). Como pode ser observado, em polarização direta inicialmente a corrente aumenta até um valor máximo  $I_p$ , com respectiva tensão  $V_p$ , e decresce até um valor mínimo  $I_v$ . Para tensões maiores que  $V_v$  a corrente aumenta exponencialmente com a tensão aplicada. A curva característica é a resultante de três componentes de corrente: corrente de tunelamento banda-a-banda, corrente de excesso de portadores e corrente térmica, como evidencia a figura 9.15(b).

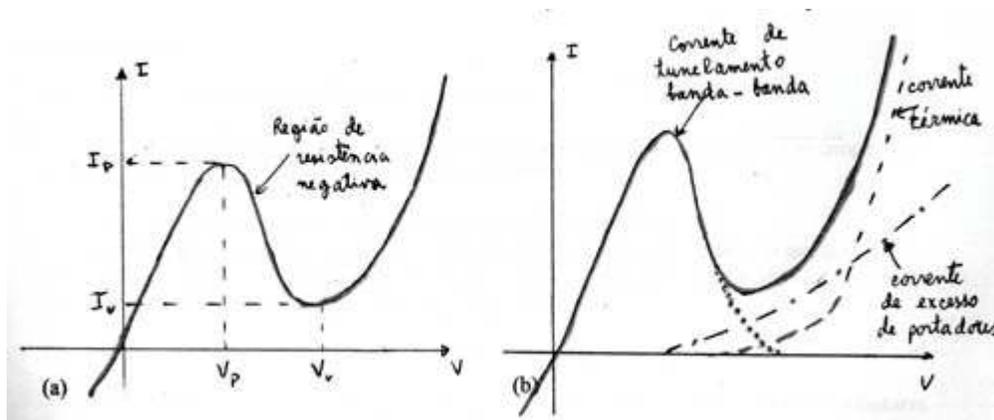


Fig. 9.15 - Curva característica de um diodo túnel

A corrente de tunelamento é igual a zero quando não há tensão externa aplicada. quando é aplicada tensão externa os elétrons podem “tunelar” da banda de valência para a banda de condução ou vice-versa.

As condições para que haja tunelamento são:

- existência de estados de energia ocupados no lado do qual o elétron tunelará;
- existência de estados de energia desocupados no mesmo nível de energia dos estados ocupados no lado para o qual os elétrons podem tunelar;
- a altura da barreira do potencial de tunelamento deve ser suficientemente pequena para que haja uma probabilidade finita de tunelamento;
- o momentum deve ser conservado durante o processo de tunelamento.

A simbologia desse diodo está representada na figura 9.16

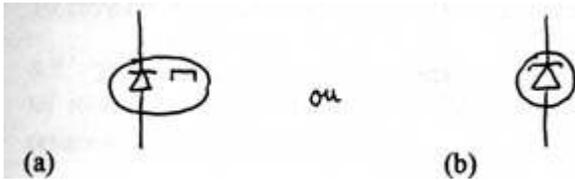


Fig. 9.16. Representação do diodo túnel. A forma (b) é a mais comumente utilizada.

As principais aplicações desse diodo são a produção de microondas de baixa potência, como osciladores ou bloqueadores de frequência.

#### REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- D. Halliday, R. Resnick, *Fundamentos de Física Vol 4*, São Paulo: Livros Técnicos e Científicos, 1994.  
H. A. Mello, R.S. Biasi - *Introdução à Física dos Semicondutores*, São Paulo: Editora Edgard Blücher Ltda, 1975.  
R.F. Pierret - *Semiconductor Fundamentals*, Modular Series on Solid State Devices, Vol I, EUA: Addison-Wesley Publishing Company, 1989  
G.W. Neudeck - *The PN Junction Diode*, Modular Series on Solid State Devices, Vol II, EUA: Addison-Wesley Publishing Company, 1989

#### PROBLEMAS

9.1. - Definir corrente de deriva e corrente de difusão.

9.2. - A mobilidade dos elétrons numa amostra de silício é de  $1300 \text{ cm}^2/\text{V.s}$  a temperatura ambiente, determinar o coeficiente de difusão dos elétrons.

9.3. - Usando o diagrama de bandas de energia indicar como visualizar :

a) a existência de um campo elétrico dentro do semiconductor; b) um elétron com energia cinética zero; c) um buraco com energia cinética zero igual a  $E_G/4$ ; d) geração térmica direta; e) recombinação térmica direta; e) recombinação via centros R-G.

9.4. - Dada uma barra de silício de comprimento de 6cm e área de seção transversal de  $4 \text{ cm}^2$  determinar:

(a) a resistividade da barra sabendo que ela foi dopada uniformemente com impurezas aceitadoras numa concentração de  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ;

(b) a densidade de corrente através da barra de silício intrínseco sabendo-se que lhe é aplicada uma diferença de potencial de 5 V;

(c) a corrente através da barra se o silício for dopado com impurezas doadoras com perfil de portadores variando linearmente de  $10^{19} \text{ cm}^{-3}$  em uma das pontas para  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$  na ponta oposta, sabendo-se que nenhum campo elétrico é aplicado à barra e o perfil de portadores é linear entre as duas pontas.

Dados :  $kT = 0,026 \text{ eV}$     $n_i = 1,45 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$     $E_G = 1,1 \text{ eV}$     $\mu_n = 1350 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$     $D_p = 35 \text{ cm}^2/\text{s}$   
 $\mu_p = 480 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$     $D_p = 12 \text{ cm}^2/\text{s}$     $T = 300\text{K}$     $k = 1,381 \cdot 10^2 \text{ J/K}$

9.5. - Uma amostra de silício, mantida a temperatura ambiente, está uniformemente dopada com  $N_D = 10^{10}/\text{cm}^3$ . Calcular sua resistividade.

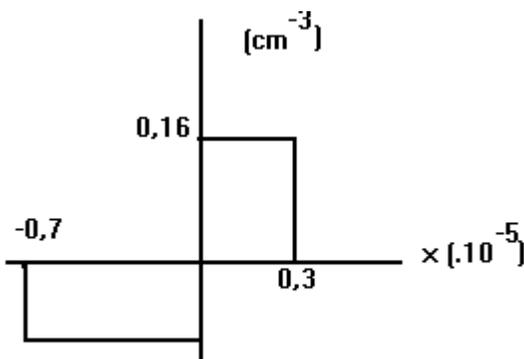
9.6. - Calcular a mobilidade dos buracos dentro de uma barra na qual a velocidade de deriva de  $10^3 \text{ cm/s}$  resulta quando se aplicam 2V na extremidade da barra que tem o comprimento de 1cm.

9.7. - Duas barras do mesmo material, uma tipo  $N$  e outra tipo  $P$  são uniformemente dopadas de tal modo que  $N_D$  (na barra 1) =  $N_A$  (na barra 2)  $\gg n_i$ . Dizer qual barra apresenta maior resistividade e explicar porque.

9.8. - Para uma junção  $PN$  abrupta de silício, em equilíbrio térmico, com distribuição de cargas conforme o gráfico abaixo, pede-se:

a) desenhar o gráfico do campo elétrico em função da distância  $x$  indicando o valor numérico do campo elétrico máximo. Deduzir as expressões necessárias a partir da equação de Poisson.

b) determinar o valor do potencial de difusão  $V_0$  em volts. Deduzir as expressões necessárias a partir da equação de Poisson.



9.9. - Uma junção  $PN$  abrupta no silício tem a seguinte concentração :  $N_D = 5 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$  e  $N_A = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$  e uma área transversal de  $10^{-4} \text{ cm}^2$ . Considerando a aproximação de depleção e  $n_i = 10^{10} \text{ cm}^{-3}$  determinar :

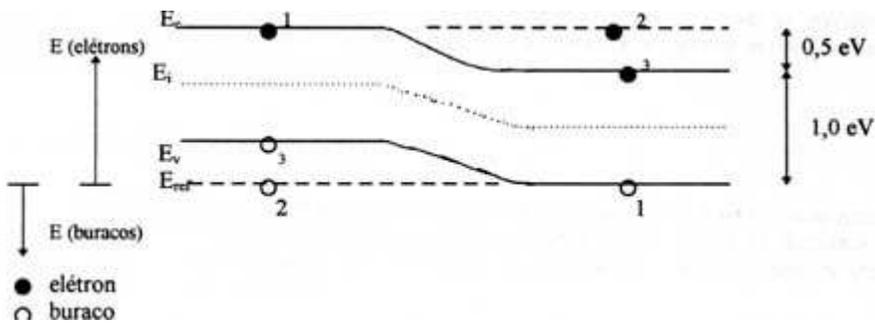
(a) o potencial de difusão; (b) os extremos da região de depleção; (c) a porcentagem da região de depleção que está na região  $P$ ; (d) o esquema da densidade de carga e do campo elétrico em função de  $x$ .

9.10.- Sabendo-se que:  $n(E) = f(E, E_F) \cdot S(E)$     $v(E) = S(E) - S(E) \cdot f(E, E_F)$

onde  $n(E)$  é a densidade dos estados preenchidos;  $v(E)$  é a densidade dos estados vazios,  $S(E)$  é a densidade dos estados eletrônicos permitidos e  $f(E, E_F)$  é a função de distribuição de Fermi-Dirac, demonstrar que numa junção  $PN$  em equilíbrio térmico o nível de Fermi é igual dos dois lados da junção.

9.11. - Preencher a tabela abaixo com dados obtidos a partir do diagrama de bandas que se segue

Portador	Elétron 1	Elétron 2	Elétron 3	Buraco 1	Buraco 2	Buraco 3
Energia cinética (eV)						
Energia potencial (eV)						
Energia total (eV)						



# 10 ESTRUTURA CRISTALINA

## 10.1 INTRODUÇÃO

Desde a antigüidade os homens perceberam que alguns tipos de materiais cristalinos tinham superfícies planas bem definidas com simetrias constantes. Esse fato deu origem a idéia de que cada um desses materiais seria formado por elementos muito menores com a mesma forma, que, justapostos, dariam origem ao cristal. Essa idéia não é de todo errada pois pode-se interpretar um cristal como a superposição de células primitivas, com a diferença porém que as células primitivas não precisam ter o mesmo formato que o cristal.

## 10.2. REDE CRISTALINA E BASE

Para uma análise mais conveniente é interessante separar a estrutura cristalina em duas entidades: uma geométrica abstrata, chamada rede, que indica a simetria existente entre os elementos que a formam e outra, chamada base, que representa os átomos ou grupos de átomos que são associados repetitivamente à rede.

$$\text{rede} + \text{base} \Rightarrow \text{estrutura cristalina}$$

A figura 10.1 mostra uma rede plana bidimensional: (a) uma base que pode ser associadas a ela (b) e a estrutura cristalina resultante (c).

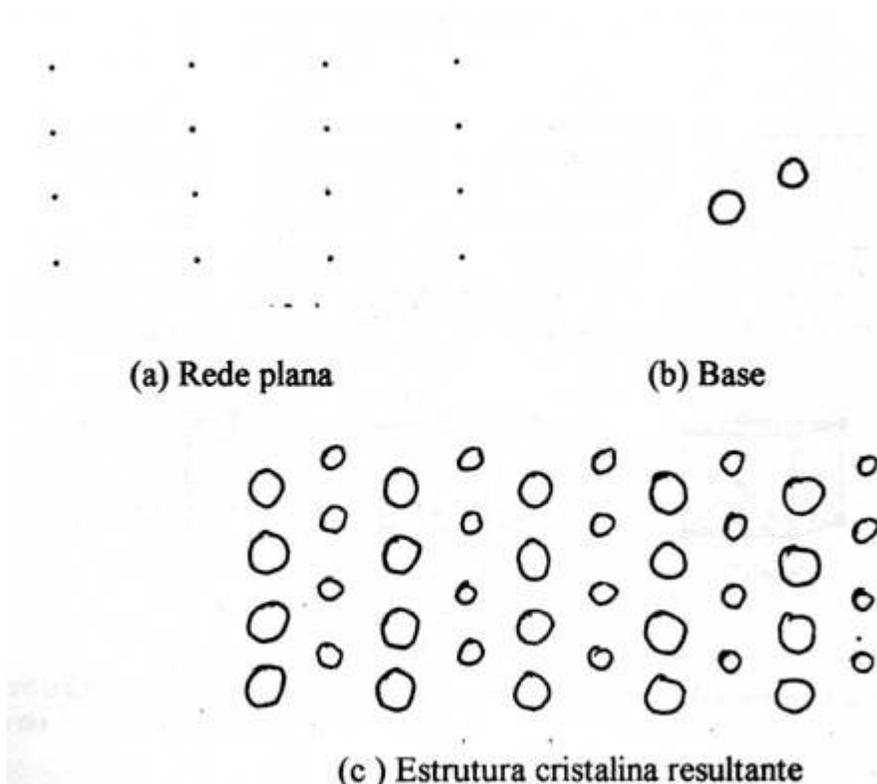


Fig. 10.1. (a) Rede plana; (b) base; (c) estrutura cristalina resultante

A base pode ser formada por um só átomo, como numa rede metálica, mas também pode ser constituída de milhares de átomos como no caso de uma substância orgânica.

### 10.3. SISTEMAS CRISTALINOS E REDES DE BRAVAIS

Utilizando a idéia de conceito de rede que independe dos átomos que estão associados a ela foi possível fazer uma simplificação descritiva e classificar todas as redes cristalinas em catorze tipos, que são denominadas as “redes Bravais”, figura 10.2. Utilizando esse conjunto, é possível classificar qualquer material cristalino, já que as redes representam somente a disposição obedecida pelos elementos do material e não todos os átomos que o formam.

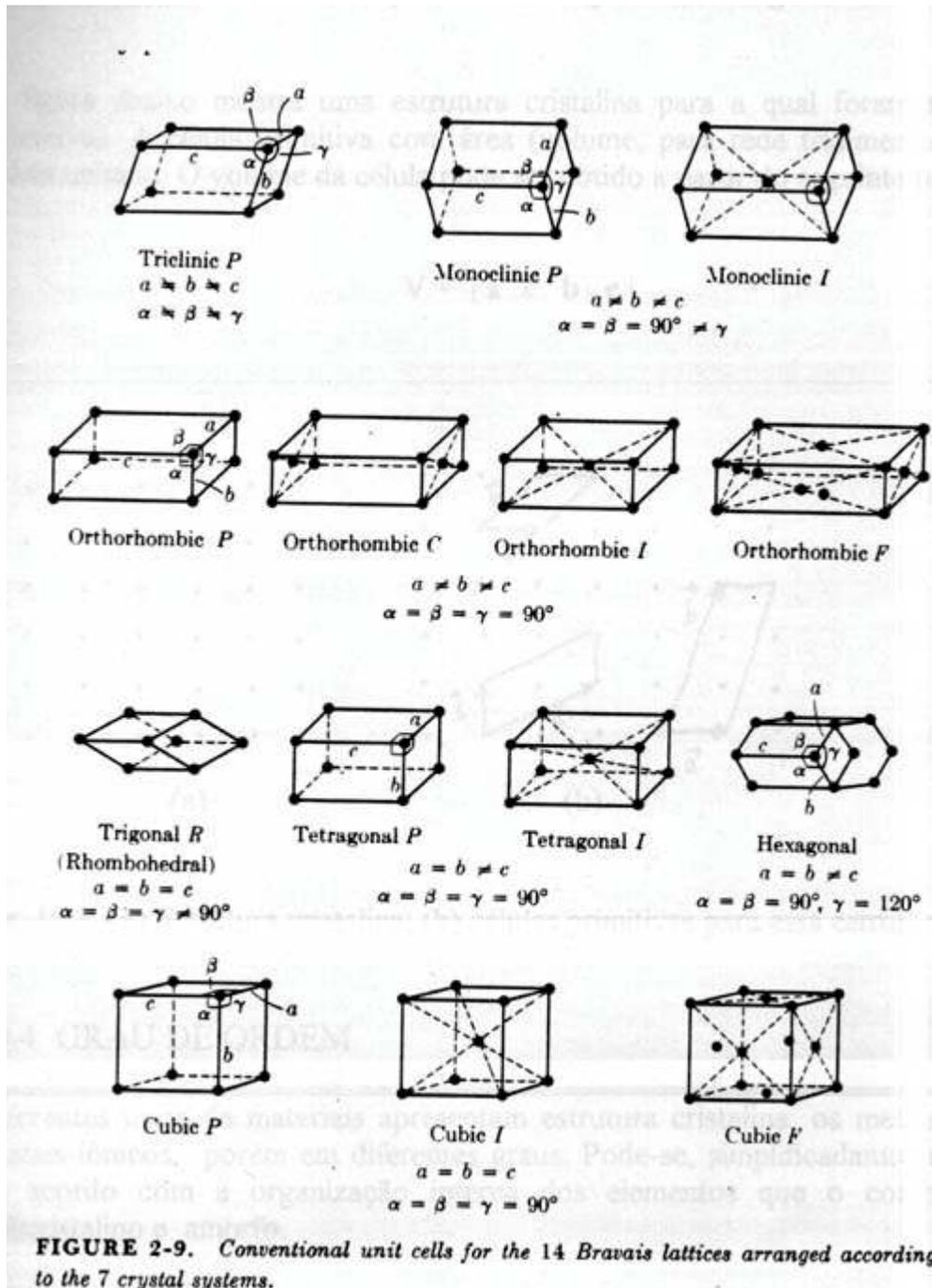


Fig. 10.2. - Representação das Redes de Bravais.

### 10.3.1 Célula primitiva

Partindo de um ponto da rede considerado a origem,  $r_0$ , é possível reproduzir todos os outros pontos utilizando uma base de vetores. A base de vetores é formada pelos vetores que constituem a célula primitiva. O cristal inteiro é gerado pela superposição de células primitivas. Este conceito pode ser expresso pela seguinte equação:

$$\mathbf{r} = r_0 + n_1 \mathbf{a} + n_2 \mathbf{b} + n_3 \mathbf{c} \quad (10.1)$$

onde  $n_1$ ,  $n_2$  e  $n_3$  são inteiros positivos ou negativos e o negrito indica que se trata de vetor.

A figura abaixo mostra uma estrutura cristalina para a qual foram traçadas diversas células primitivas. A célula primitiva com área (volume, para rede tridimensional) mínima é chamada célula unitária. O volume da célula pode ser obtido a partir do seguinte produto misto:

$$V = | \mathbf{a} \times \mathbf{b} \cdot \mathbf{c} | \quad (10.2)$$

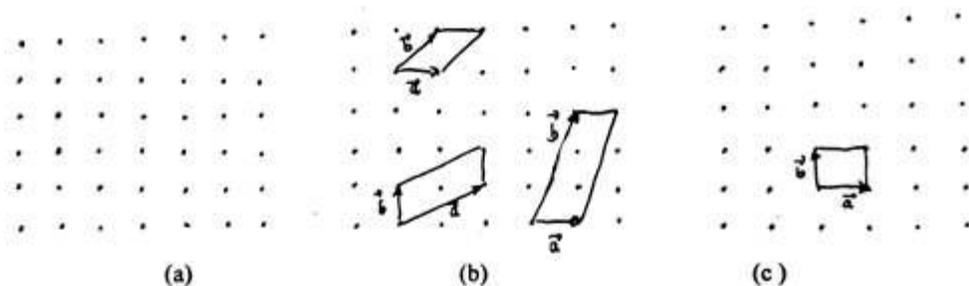


Fig. 10.3. (a) Estrutura cristalina; (b) células primitivas para essa estrutura; (c) célula unitária

### 10.4 GRAU DE ORDEM

Diferentes tipos de materiais apresentam estrutura cristalina: os metais, os semicondutores, os cristais iônicos, porém em diferentes graus. Pode-se, simplificada, classificar um material de acordo com a organização interna dos elementos que o compõe em: monocristalino, policristalino e amorfo.

Essa classificação refere-se ao grau de ordem existente no material. Quando o cristal se apresenta exatamente da mesma forma em pontos equivalentes, trata-se da ordem a longo alcance, e nesse caso o material é um monocristal, quando a ordem é a curto alcance ou em pequenas porções no material tem-se um policristal e se não houver nenhuma ordem o material é amorfo.



Fig. 10.4- (a) material amorfo; (b) material policristalino; (c) material monocristal.

## 10.5 ÍNDICES DE MÜLLER

Uma ferramenta bastante útil para representar qualquer plano cristalino é fornecida pelos índices de Müller, que são três números inteiros  $h$ ,  $k$  e  $l$  usados para definir planos no espaço. Dado um sistema de três eixos ortogonais os índices de um certo plano podem ser obtidos da seguinte forma:

- determinam-se as interseções do plano com os eixos do sistema exprimindo-as como múltiplos inteiros dos vetores de base;
- obtém-se o inverso desses valores;
- faz-se o mínimo múltiplo comum entre eles e elimina-se o denominador, obtendo-se o conjunto dos menores inteiros que mantêm entre si a mesma relação que os inversos das interseções.

Esses inteiros são os índices de Müller do plano e são representados por  $(h\ k\ l)$ .

A figura 10.5 mostra alguns planos e seus índices de Müller.

Cristalograficamente diversos planos podem ser equivalentes, por exemplo, para o silício uma rotação que rebate os planos  $xy$ ,  $yz$  e  $zx$  entre si não altera o material pois a simetria é cúbica, isso quer dizer que os planos  $(100)$ ,  $(010)$ ,  $(001)$ ,  $(\bar{1}00)$ ,  $(0\bar{1}0)$  e  $(00\bar{1})$  são equivalentes. Então para esse conjunto será adotada a convenção  $\{100\}$ .

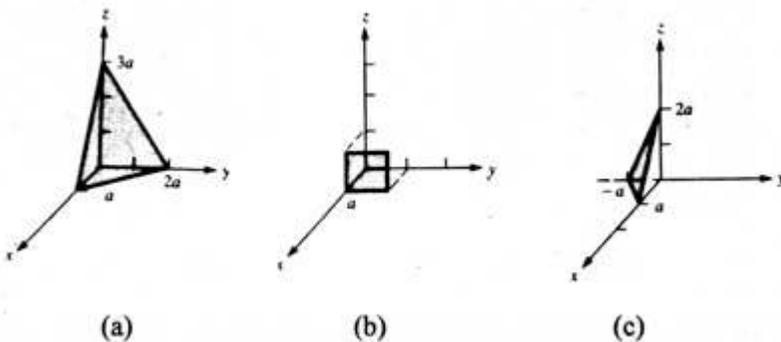


Fig. 10.5 - Numa estrutura cristalina cúbica simples: (a) o plano (632); (b) o plano (100); (c) o plano (221).

Os índices de Müller também podem ser usados para indicar direções em vez de planos. Nesse caso as projeções da direção sobre os eixos cristalinicos dão origem aos índices. Note-se que um plano terá os mesmos índices que a direção perpendicular a ele, porém com outra representação:  $\langle h k l \rangle$ . Aqui também é possível uma generalização, o conjunto das direções equivalentes são apresentadas da seguinte forma:  $[h k l]$ . A figura 10.6 mostra algumas direções cristalinicas.

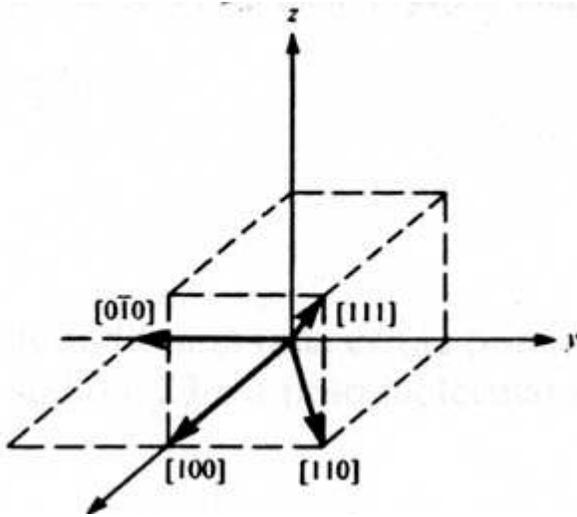


Fig. 10.6 - Algumas direções e seus índices de Müller

## 10.6 ESTRUTURA DO SILÍCIO

O silício é um material semiconductor em que as ligações entre os átomos são do tipo covalente, havendo quatro vizinhos mais próximos para cada átomo, com os quais faz quatro ligações covalentes, ou seja, com os quais compartilha um elétron.

O silício tem uma rede cúbica do tipo do diamante. A célula primitiva é formada por uma estrutura cúbica face centrada com mais quatro átomos colocados internamente ao cubo; esses átomos estão distribuídos dois em cada um dos planos (001) que cortam a célula a  $\frac{1}{4}$  e a  $\frac{3}{4}$  da base de modo alternado. Veja-se a figura 10.7 (a). A estrutura cristalina do silício também pode ser interpretada como duas redes tipo “face cúbica centrada” interpenetradas como pode ser visto na figura 10.7 (b).

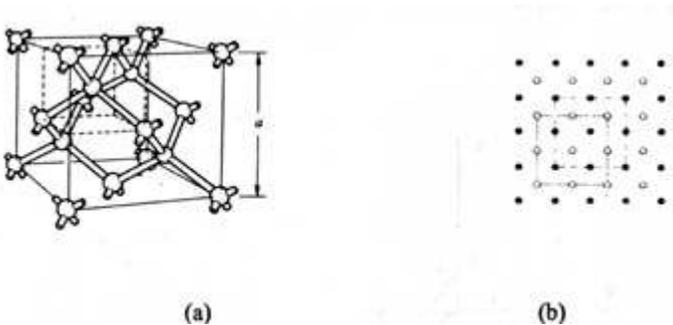


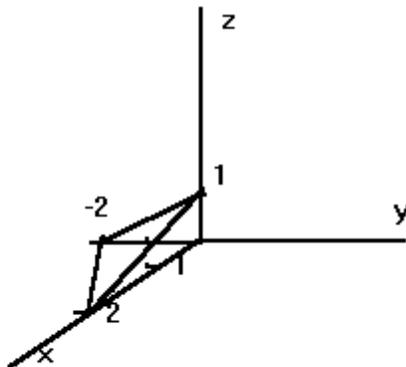
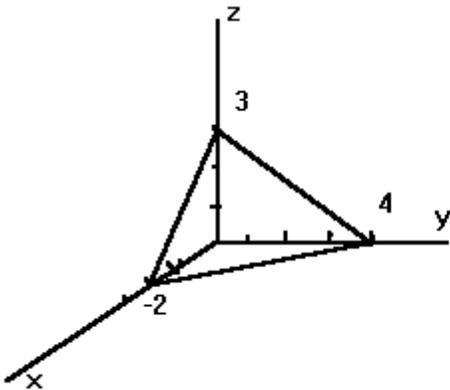
Fig. 10.7 - Estrutura de silício (a) tipo diamante ; (b) duas estrutura fcc interpenetradas vistas de topo ao longo de qualquer uma das direções  $\langle 100 \rangle$ .

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- H. A. Mello, R.S. Biasi - *Introdução à Física dos Semicondutores*, São Paulo: Editora Edgard Blücher Ltda, 1975.  
R.F. Pierret - *Semiconductor Fundamentals*, Modular Series on Solid State Devices, Vol I, EUA: Addison-Wesley Publishing Company, 1989  
J.M. Ziman - *Principles of The Theory of Solids: The Syndics of The Cambridge University Press*, 1965  
F. C. Brown - *The Physics of Solids: Ionic Crystals, Lattice Vibrations, and Imperfections*; W.A. Benjamin Inc., 1967  
Kittel - *Physics of Solid State*:

## PROBLEMAS

- 10.1 - O cloreto de sódio tem uma célula primitiva cúbica simples de lado igual a  $5,63 \cdot 10^{-8}$  cm. O peso atômico do sódio é 23 e a peso molecular do cloro é 71. Determinar a densidade do cloreto de sódio.
- 10.2. - Dada a constante da rede,  $a = 5,65 \cdot 10^{-8}$  cm, determinar o número de átomos de Ge por  $\text{cm}^3$  à temperatura ambiente.
- 10.3 - Em termo da constante da rede  $a$ , qual é distância entre átomos vizinhos nas redes: a) cúbica corpo centrado; b) cúbica face centrada.
- 10.4. - Determinar quantos átomos por célula primitiva existem nas redes : a) cúbica corpo centrado; b) cúbica face centrada; c) hexagonal.
- 10.5. - A superfície de uma lâmina de silício é um plano (100).  
a) esquematizar a localização dos átomos de silício na superfície da lâmina;  
b) determine o número de átomos por cm na superfície da lâmina;  
c) repetir as questões anteriores se a superfície da lâmina for o plano (110).
- 10.6. - Considerando um sistema cúbico desenhe os seguintes planos: (a) (001); (b) (111); (c) (123); (d) (110); (e) (010); (f) (111); (g) (221); (h) (010)
- 10.7. - Supondo uma estrutura cristalina cúbica determinar os índices de Müller dos planos esquematizados. Indicar, na notação de Müller, os vetores perpendiculares a esses planos e apresentar os planos equivalentes àqueles dados.



10.8 - Definir rede cristalina.

10.9 - Definir estrutura cristalina.

10.10 - Dizer quantas redes unitárias bidimensionais existem e explicar porque.

10.11 - Desenhar o plano (121) de uma estrutura ortorrômbica de corpo centrado.

10.12 - Determinar a densidade superficial de átomos do plano (110) de uma estrutura ortorrômbica de base centrada sabendo que  $\mathbf{a} = 1\text{A}$ ;  $\mathbf{b} = 1,5\text{ A}$  e  $\mathbf{c} = 3\text{ A}$ .