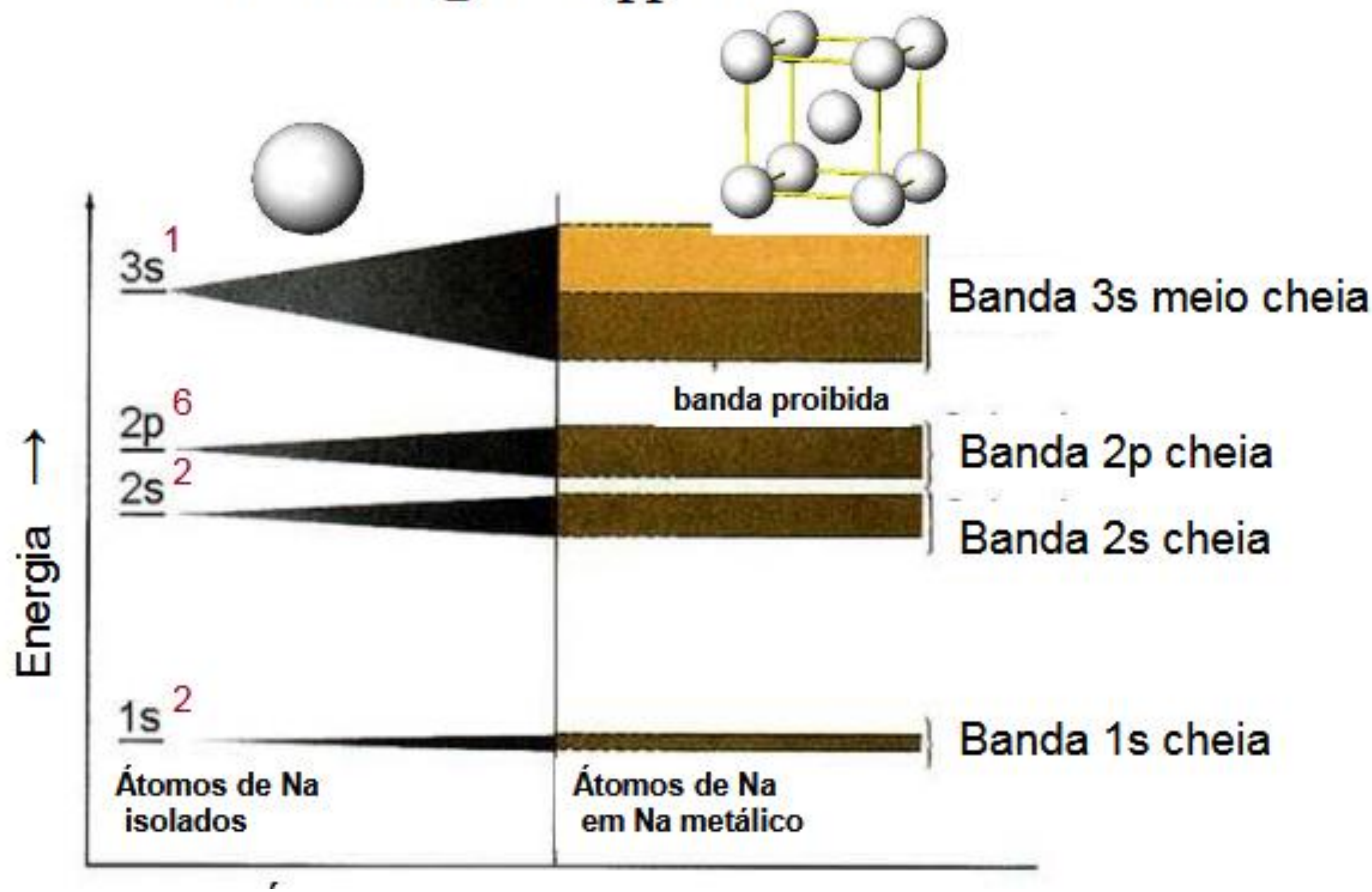
Níveis (ou bandas) de energia

Exemplo: $_{11}$Na



Condução em Sólidos – continuação:

O que torna um material bom condutor?

Um resposta geral seria que isto depende dos estados permitidos para os elétrons e da energia destes estados. Saber quais são estes é tarefa impossível dado ao grande numero e portanto da complexidade do problema. Contudo, dá para saber a distribuição destes $N(E)$ estados, ou seja, o número deles entre as energias E e $E+dE$. Pode ser demonstrado que:

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

Usando os dados numéricos m = 9,11 x 10^{-31} Kg e h = 6,626 x 10 $^{-34}$ J. s temos:

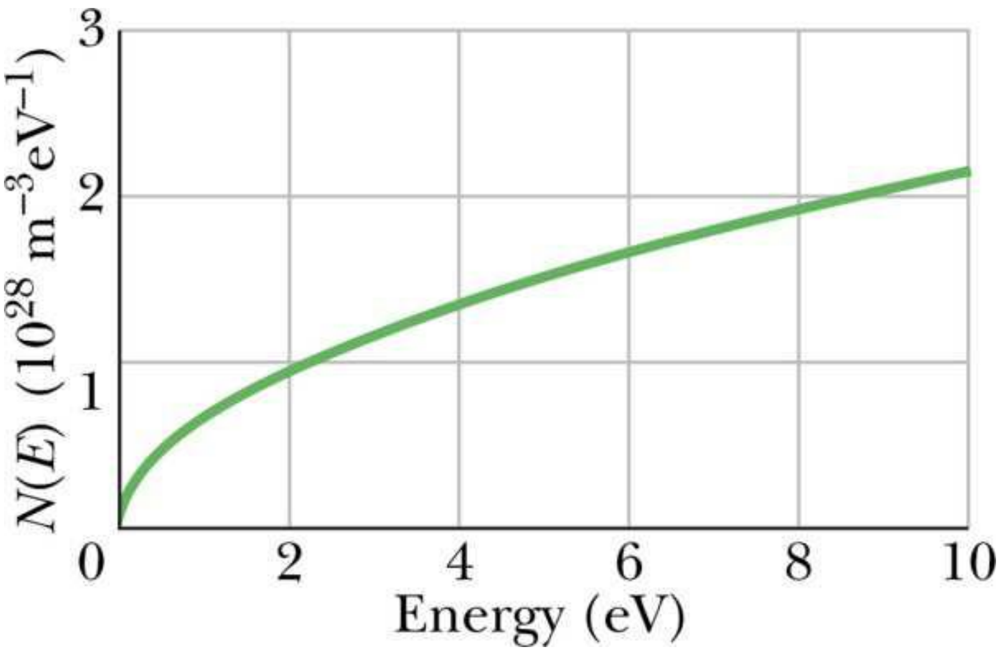
$$N(E) = 1{,}06 \times 10^{56} E^{1/2} (m^{-3} J^{-1})$$

ou

$$N(E) = 6{,}8 \times 10^{27} E^{1/2} (m^{-3} eV^{-1})$$

Interpretação de N(E):
Densidade de estados quânticos [nº de estados / (m^3 eV)] :

N(E)dE = nº de níveis de energia disponíveis para os elétrons no intervalo de energia entre *E e E+dE* por unidade de volume



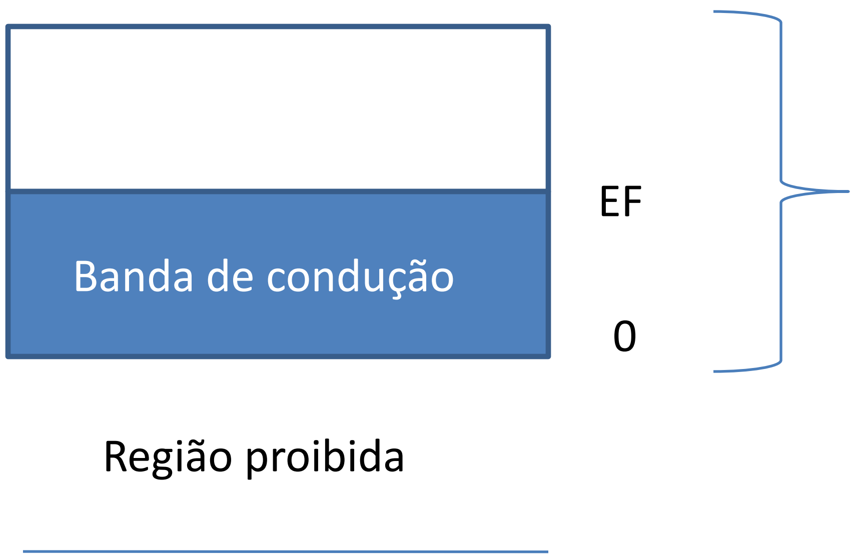
Não depende da forma, tamanho e material da amostra.
É função apenas da energia!!

2) Contagem de estados para T = 0 K:

- Até nível de Fermi, todos os estados estão ocupados (mais baixa energia)
- acima do nível de Fermi, todos os estados estão vazios

- ESTATÍSTICA: peso para cada estado de energia

P(E) função probabilidade = 1 certeza que o estado está ocupado
P(E) função probabilidade = 0 certeza que o estado está vazio

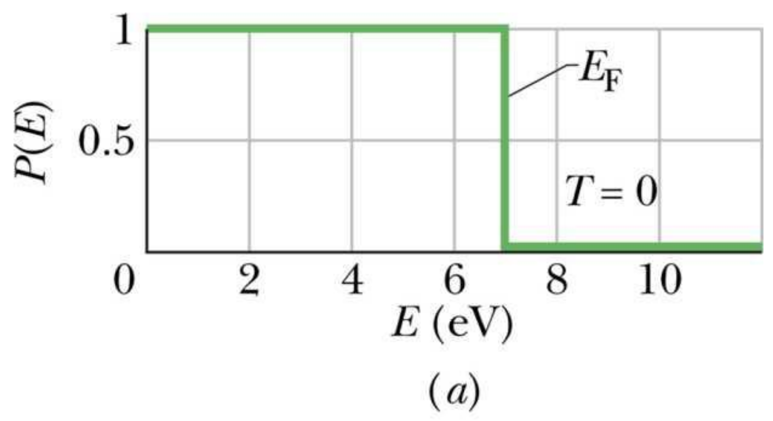


$$E > E_F \quad P(E) = 0$$
$$E \le E_F \quad P(E) = 1$$

• Probabilidade de ocupação ***P(E) [Estatística de Fermi-Dirac] :***

P(E) = probabilidade de que nível de energia E esteja ocupado por um elétron

$$P(E)=\frac{1}{1+\exp[(E-E_F)/KT]}$$



Num condutor, o nível de Fermi é o estado quântico cujo o elétron de condução tem 50% de chance de ser encontrado

Exercício: Qual é a probabilidade que um estado quântico com energia 0,1 eV maior que a energia de Fermi seja ocupado por um elétron em um condutor a 800 K?

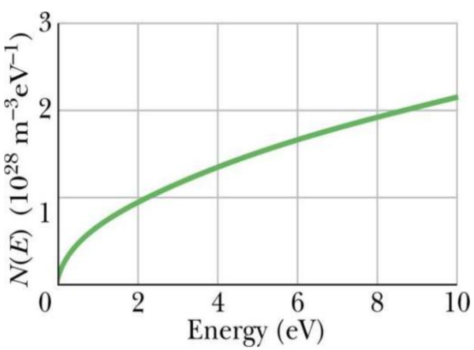
Vamos primeiramente calcular o fator exponencial da probabilidade de ocupação:

$$P(E) = \frac{1}{1 + \exp[(E - E_F)/KT]}$$

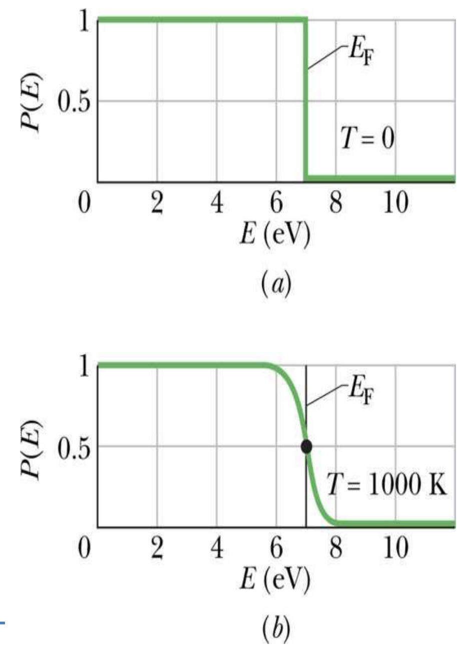
$$\frac{(E - E_F)}{KT} = \frac{0{,}1eV}{8{,}62 \times 10^{-5}\, eV/K \times 800K} = 1{,}45$$

$$P(E) = \frac{1}{1 + \exp[1{,}45]} = 0{,}19 \;\; \text{ou}\; 19\%$$

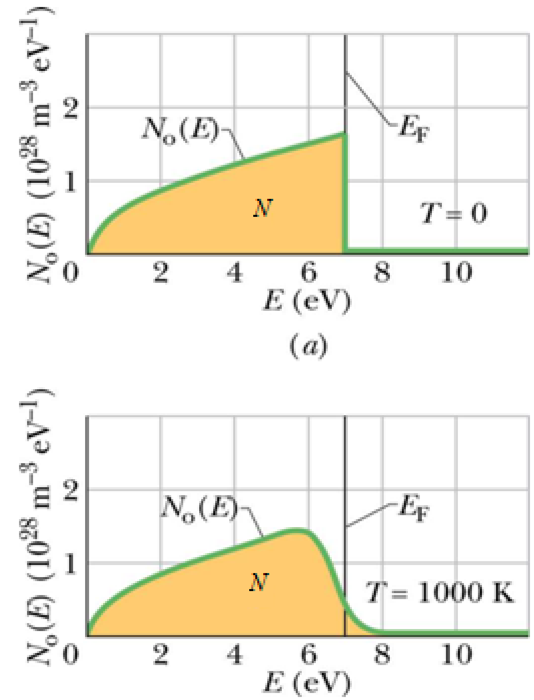
Densidade de estados ocupados $N_0 = N(E)\,P(E)$



X

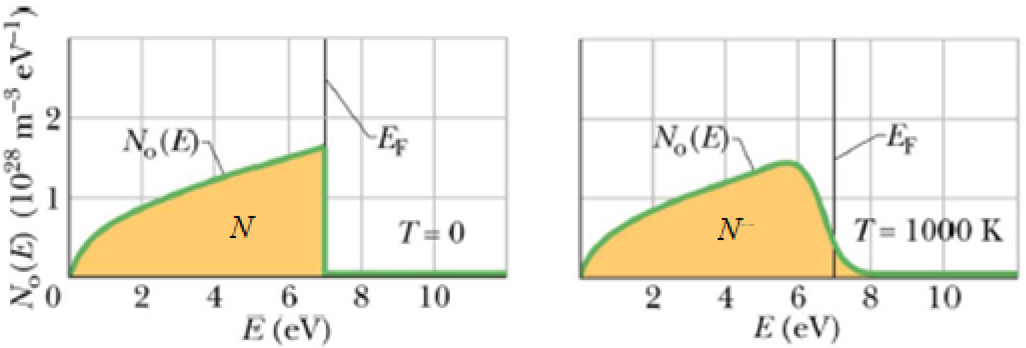


=



Metal

• Densidade de estados ocupados: $\boxed{N_0(E) = N(E)\,P(E)}$



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

Para T = 0 K, o nº de elétrons de condução do metal (por unid. de vol.) é:

$$\boldsymbol{N} = \int_0^{\infty} N_0(E)dE = \int_0^{E_F} N(E)dE = \frac{8\sqrt{2}\pi m^{3/2}}{h^3}\frac{2E_F^{3/2}}{3}$$

T = 0 K $\Rightarrow$ $N_0(E) = N(E)$ quando $E<E_F$ (pois $P(E<E_F)=1$)

$N_0(E) = 0$ quando $E>E_F$ (pois $P(E>E_F) = 0$)

Portanto, em T = 0 K: $\boxed{E_F = \left(\frac{3}{16\sqrt{2}\pi}\right)^{2/3} \frac{h^2}{m} N^{2/3} \cong \frac{0.121 h^2}{m} N^{2/3}}$

Cálculo da Energia de Fermi

$$N = \int_0^{E_F} N(E)dE = \int_0^{E_F} \frac{8\pi}{h^3}\left(2m^3E\right)^{1/2} dE = \frac{8\pi}{h^3}\left(2m^3\right)^{1/2}\left[\frac{E^{3/2}}{3/2}\right]_0^{E_F}$$

$$N = \frac{16\pi}{3h^3}\left(2m^3\right)^{1/2} E_F^{3/2}$$

isolando E_F, temos:

$$A = 3,65\times10^{-19}\ (m^2eV)$$

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

massa do elétron

Sabendo *n* (n° de elétrons de condução por volume) calcula-se E_F

Ex. 1) Qual é a energia de Fermi do ouro, um metal monovalente com massa molar de 197 g/mol e densidade de 19,3 g/cm^3?

Dados: hc = 1240 keV.pm, $m_{\text{elétron}}$ = 511 keV/c^2, $N_A = 6{,}02\times10^{23}$ mol^{-1}

[Halliday, 41.10 (7ª ed.), 12 (8ª ed.), 28 (9ª ed.)]

Resposta:

Energia de Fermi de um metal: $E_F = \left(\dfrac{3}{16\sqrt{2}\pi}\right)^{2/3} \dfrac{h^2}{m} N^{2/3}$

Número de elétrons de condução por unidade de volume do metal: $N = n_{\text{át}} \times n_{\text{el.val.}}$, onde $n_{\text{át}}$ é o número de átomos do metal por unidade de volume e $n_{\text{el.val.}}$ é o número de elétrons de valência.

Metal monovalente $\Rightarrow n_{\text{el.val.}}$ = 1 elétron/átomo

Massa do elétron: $m \cong 9{,}109\times10^{-31}$ kg

$$N = \left(1\frac{\text{elétron}}{\text{átomo}}\right)\left(\frac{19{,}3\,g/cm^3}{197\,g/mol}\times 6{,}02\times10^{23}\,\frac{\text{átomos}}{mol}\right) \cong 5{,}90\times10^{22}\,\frac{\text{elétrons}}{cm^3} = 5{,}90\times10^{-8}\,\frac{\text{elétrons}}{pm^3}$$

$$\boxed{\therefore E_F = \left(\frac{3}{16\sqrt{2}\pi}\right)^{2/3} \frac{h^2}{m} N^{2/3} \cong 5{,}53eV}$$

Ex. 2) O zinco é um metal divalente. Para esse elemento, calcule:

a) a concentração de elétrons de condução;

b) a energia de Fermi;

c) a velocidade de Fermi;

d) o comprimento de onda de de Broglie correspondente à velocidade determinada no item (c).

Dados do zinco: Densidade 7,133 g/cm³, massa molar 65,37 g/mol

[Halliday, 41.22 (7ª ed.), 25 (8ª ed.), 27 (9ª ed.)]

Respostas:

Metal divalente $\Rightarrow n_{\text{el.val.}} = 2$ elétrons/átomo

a) $N = n_{el.val.} \times n_{át.} \cong \left(2\dfrac{elétrons}{átomo}\right)\left(\dfrac{7{,}133g/cm^3}{65{,}37g/mol}\times 6{,}02\times10^{23}\dfrac{átomos}{mol}\right) \cong 1{,}31\times10^{29}\dfrac{elétrons}{m^3}$

b) $E_F = \left(\dfrac{3}{16\sqrt{2}\pi}\right)^{2/3}\dfrac{h^2}{m}N^{2/3} \cong 9{,}43eV$

c) $E_F = \dfrac{m_e v_F^2}{2} \Rightarrow v_F = \sqrt{\dfrac{2E_F}{m_e}} = \sqrt{\dfrac{2E_F}{m_e c^2}}c \cong 0{,}0061c$ ou $1{,}82\times10^6 m/s$

d) $\lambda = \dfrac{h}{p} = \dfrac{h}{m_{el}v_F} = \dfrac{hc}{\left(m_{el}c^2\right)\left(\dfrac{v_F}{c}\right)} \cong 0{,}40nm$