

Conceitos Básicos para Semicondutores

Jacobus W. Swart

O modelo do elétron livre em metais explica várias propriedades dos metais, porém falha completamente na explicação das propriedades de isolantes e de semicondutores. Isto já é esperado, tendo em vista que nos isolantes e semicondutores, os elétrons em geral não estão livres mas sim presos nas ligações covalentes entre os átomos. É por este motivo que eles apresentam baixíssima condutividade elétrica. Isto significa que necessitamos de um modelo alternativo, sendo que um modelo útil deve satisfazer aos seguintes requisitos:

- ser compreensível para que possa servir de base para a intuição sobre os problemas em estudo
- explicar as observações experimentais com razoável precisão
- ser válido em uma larga faixa de condições

O modelo de bandas de energia em sólidos é a resposta do modelo alternativo requerido, que atende aos requisitos acima. O desenvolvimento da teoria de bandas não é tarefa simples e inclui muitos conceitos novos e importantes para o aluno. A utilidade prática do modelo também pode não parecer óbvia no início. No entanto, a familiarização com ela é essencial pois, só assim sua utilidade tornar-se-á clara e simples. Sua utilização é essencial para o entendimento, projeto, fabricação, caracterização e uso de um enorme número de dispositivos eletrônicos, optoeletrônicos e sensores de todo tipo (temperatura, pressão, fluxo, pH, gases, elementos químicos, campos, radiação, etc.)

1 Modelo de Feynmann

No caso de 2 átomos de hidrogênio se aproximando, ocorre um acoplamento entre os estados quânticos de cada átomo, resultando numa divisão em 2 novos estados, dados por $E_0 - A$ e $E_0 + A$. Um efeito similar acontece ao aproximarmos N átomos de qualquer elemento. Os níveis discretos dos vários átomos, agora próximos, sofrem acoplamentos, resultando em faixas ou bandas de energias de estados permitidos, como ilustrado na Fig. 1 Cada banda formada apresenta um número muito grande de estados permitidos. Uma banda pode estar separada da próxima banda por uma faixa de energia proibida, ou seja, sem estados permitidos. A largura desta banda proibida pode variar bastante, dependendo do elemento químico constituinte do sólido, podendo inclusive ser negativo, ou seja, com a sobreposição de duas bandas consecutivas. A Fig. 2 ilustra a transformação dos estados discretos de átomos de Na em bandas de energia, com dependência da distância interatômica. Estas bandas de energia correspondem às soluções possíveis da equação de Schrödinger para diferentes distâncias entre os átomos. Observa-se dos dados da Fig. 2, que o nível 2p continua discreto mesmo para distância de 3.67Å , enquanto que os níveis de energia maior como 3s, 3p e 4s transformam-se em bandas de estados permitidos. Os átomos de Na possuem estados ocupados até o nível 3s, com 1 elétron ocupando esta orbital. Calculando-se a energia média dos elétrons para cada distância interatômica, obtém-se uma energia mínima para a distância de 3.67Å . Desta forma, esta é a distância adotada pelo sólido, por ser a situação mais estável. A figura mostra também que as bandas correspondentes aos orbitais 3s, 3p e 4s

apresentam uma sobreposição na distância interatômica natural. Como temos apenas um elétron por átomo, a banda formada apresentará muitos estados desocupados. Isto é coerente com o modelo do elétron livre.

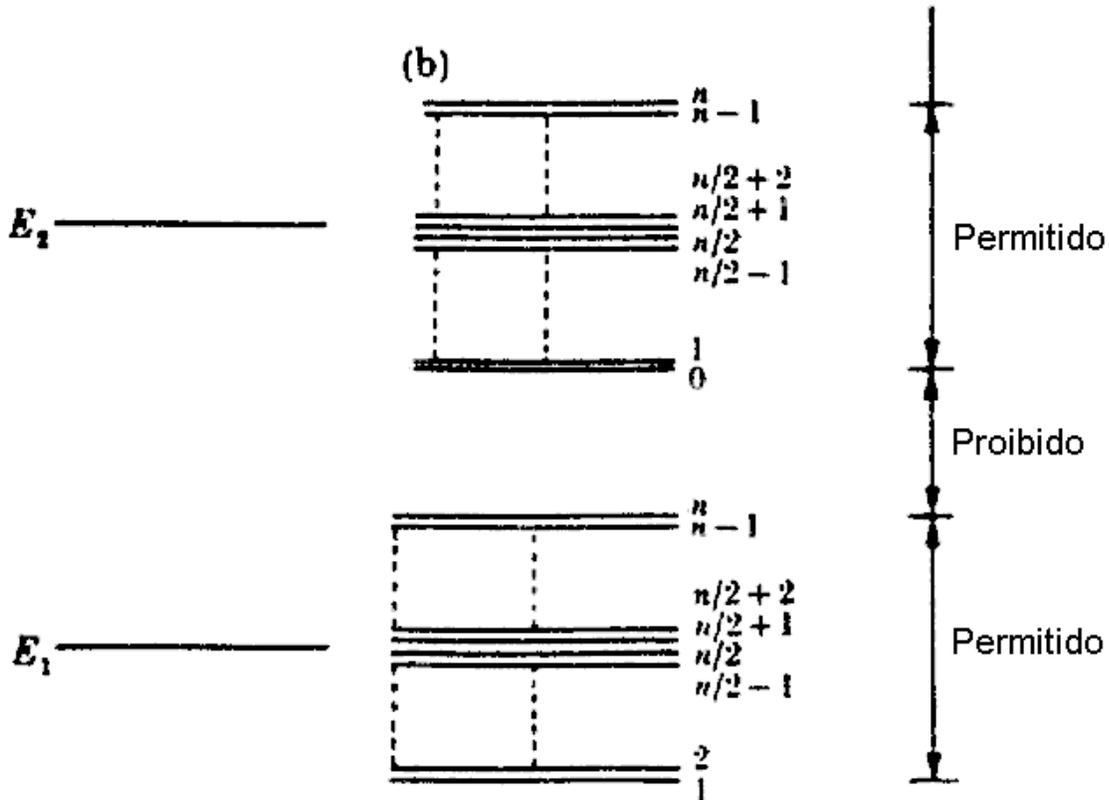


Fig. 1 Ilustração da transformação de níveis discretos de átomos isolados em bandas de energia em sólido formado pela aproximação de n átomos, resultando em n estados em cada banda.

De forma similar, aproximando-se N átomos de Si, teremos que seus orbitais da última camada ocupada, $3s$ e $3p$, com um total de 8 estados para cada átomo, sofrerão um acoplamento. Este acoplamento resulta na formação de duas bandas com um total de $4N$ estados em cada banda. O número total de estados é conservado, como no caso dos átomos da molécula de H_2 , onde tínhamos 2 estados com energia E_0-A e 2 estados com energia E_0+A . A Fig. 3 ilustra a formação das duas bandas de energia, sendo que no caso do Si elas estão separadas por uma banda de energia proibida (1.12 eV). Como cada átomo de Si apresenta 4 elétrons na camada 3 ($3s^2 + 3p^2$), estes irão preferencialmente ocupar os estados da banda inferior, chamada de banda de valência, deixando a banda superior, chamada de banda de condução, preferencialmente vazia.

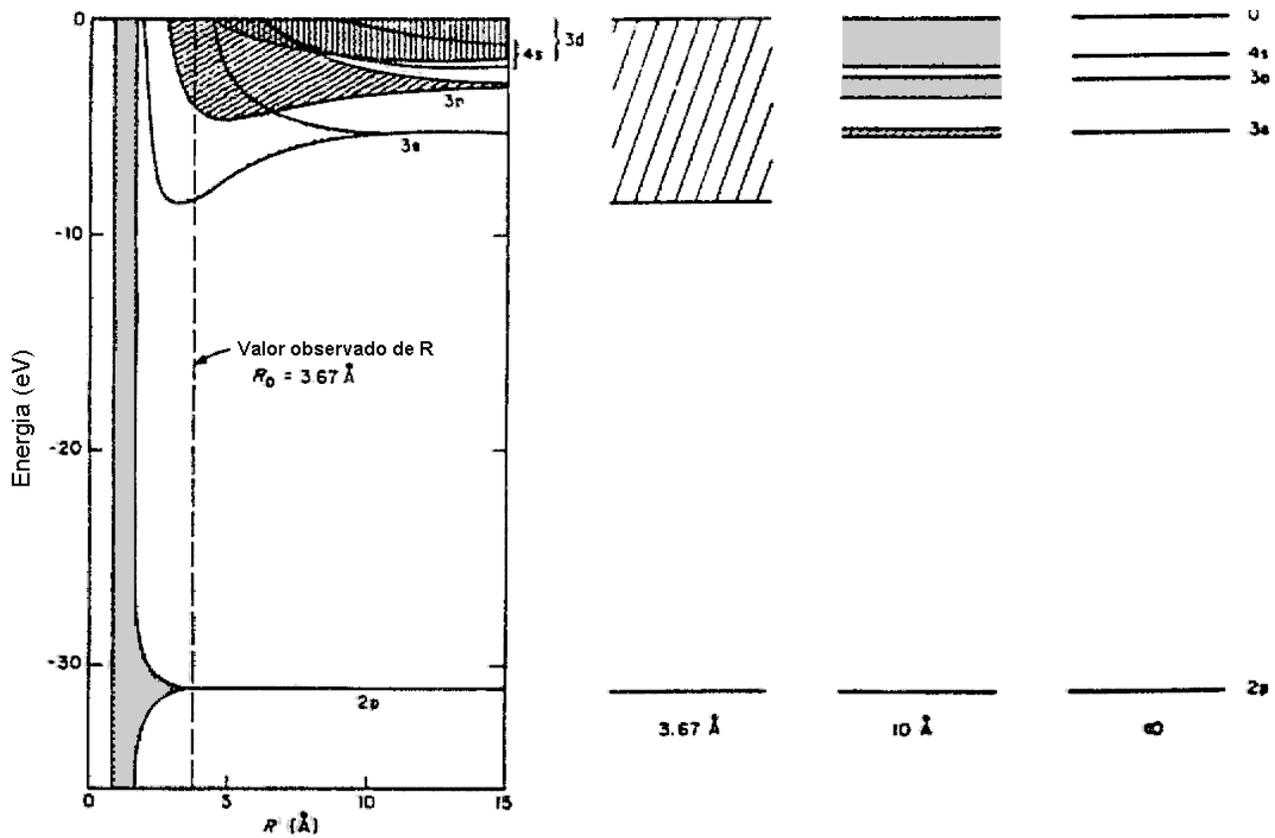


Fig. 2 Níveis de energias de estados quânticos de um sólido de sódio, variando-se a distância interatômica de 0 a 15 Å, juntamente com as bandas ou níveis discretos de energias obtidas para 3 distâncias: 3.67 Å, 10 Å e ∞ .

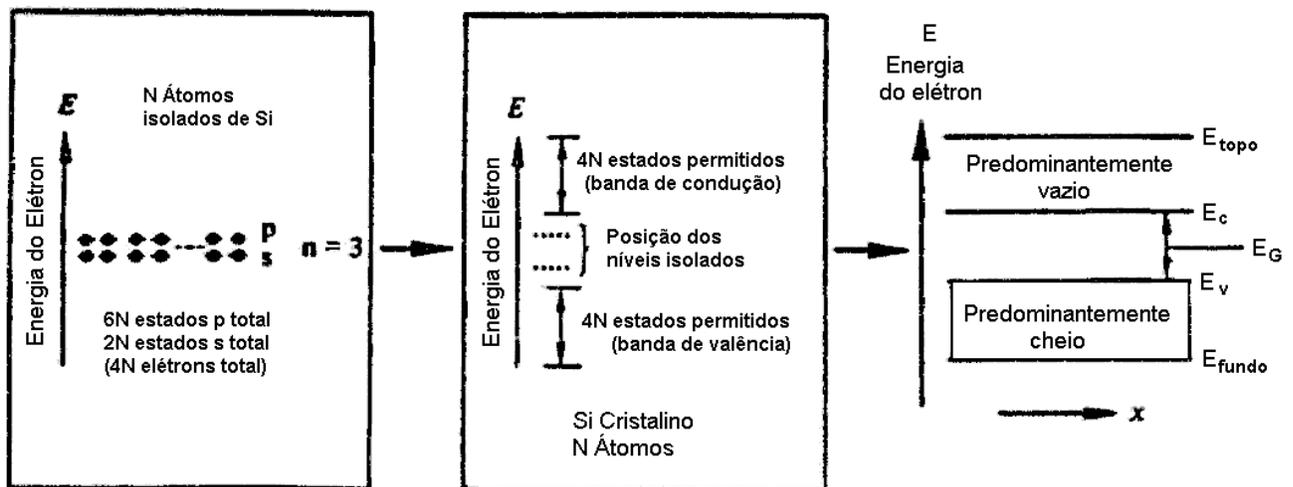


Fig. 3 Ilustração dos níveis discretos de energia dos orbitais de átomos de Si e da formação das bandas de valência e de condução de cristal de Si.

2 Metais, Semicondutores e Isolantes

Realizando medidas de condutividade elétrica à temperatura próxima de 0 K, observa-se que alguns materiais apresentam-se como bons condutores enquanto que, outros materiais como excelentes isolantes. Até as primeiras décadas do século 20, não havia uma explicação plausível para esta observação. Obtém-se uma explicação baseada no que foi exposto no presente capítulo. Vejamos a explicação baseada no modelo desenvolvido para o cristal unidimensional. Obtivemos que cada banda de energia contém um total de $2N_aL$ estados quânticos. Se cada átomo do cristal contribuir com um único elétron para uma dada banda, esta banda ficará preenchida até a sua metade (N_aL elétrons no total), ou seja, metade dos estados da banda estarão ocupados. Como na metade da altura da banda, a derivada da relação $E \times k$ é máxima (Fig. 4 e 5), este material, com uma banda ocupada pela metade, terá alta condutividade .

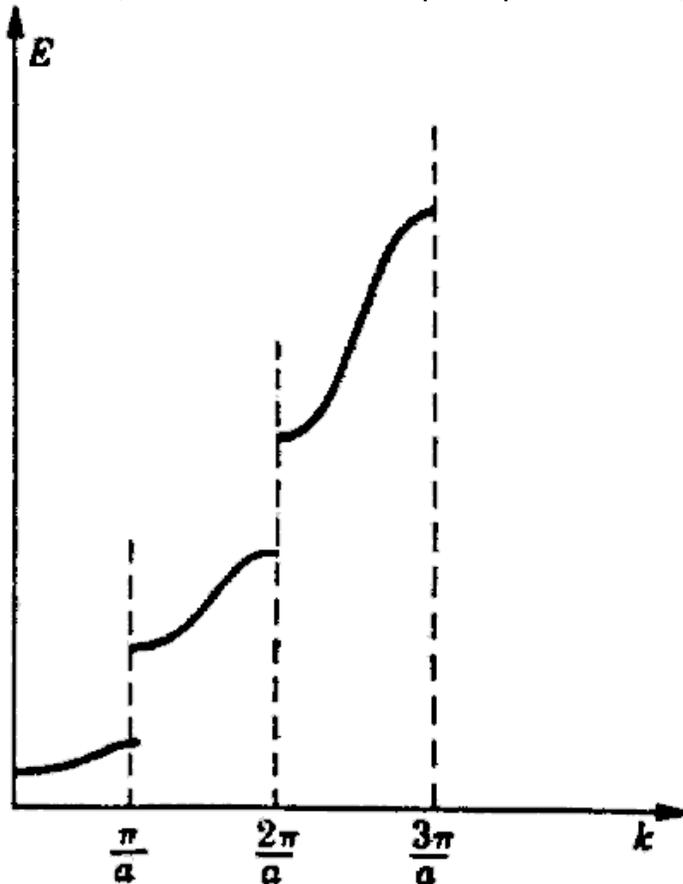


Fig. 4 Curvas de relação $E \times k$, para $k > 0$, como soluções válidas da equação de Schrödinger do modelo de Kronig e Penney.

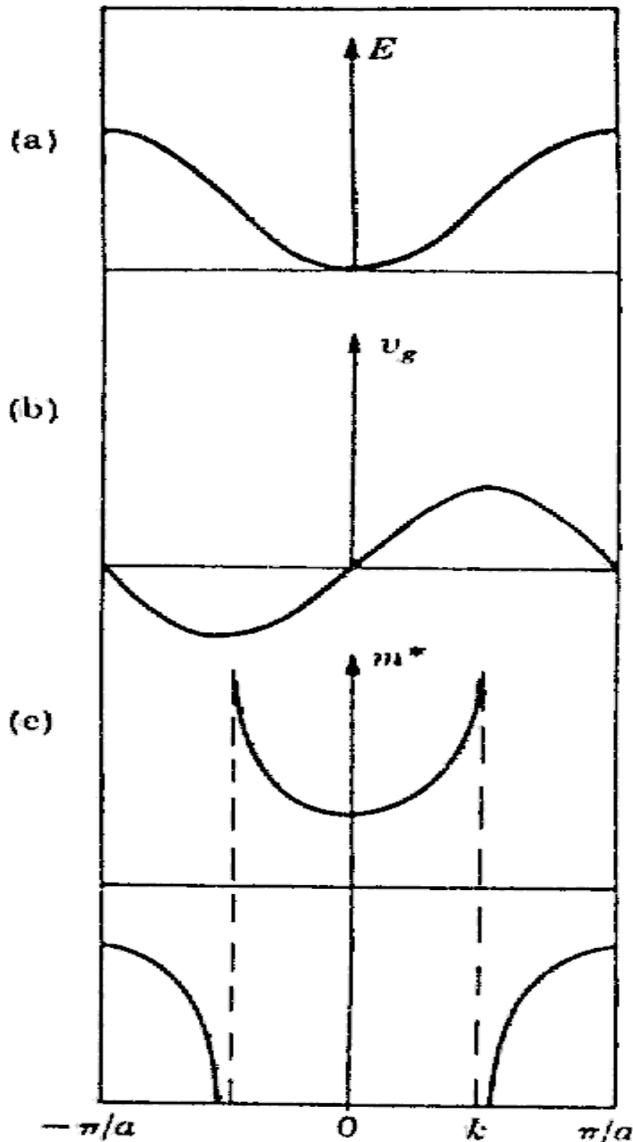


Fig. 5 (a) Relação $E \times k$ da primeira banda permitida de cristal unidimensional de estados e (b) a variação da velocidade de grupo e (c) da massa efetiva com k .

Analogamente, um material em que cada átomo contribui com dois elétrons para preencher uma banda, resulta em uma banda completamente preenchida. Vimos que, a relação $E \times k$ apresenta derivada nula (Fig. 4) para os estados do topo da banda e que como consequência o número efetivo de elétrons de condução desta banda é nulo. Este material será então um isolante, como já foi discutido no item 7.5. Analogamente, um material com átomos com número ímpar de elétrons será um condutor, enquanto que materiais com átomos com número par de elétrons será um isolante.

A regra acima funciona apenas para cristais unidimensionais. Para cristais tridimensionais e reais a regra funciona apenas parcialmente, porém continua sendo válida, de forma geral, a regra que, se a última banda estiver parcialmente cheia teremos um condutor e se a banda estiver totalmente cheia teremos um isolante. Esta regra geral no entanto também pode falhar em alguns casos, quando houver sobreposição parcial de

bandas consecutivas (largura da banda proibida negativa). Analisemos agora diagramas de energia simplificados de alguns materiais condutores, isolantes e semicondutores.

a) Condutores: são materiais caracterizados por sua última banda não totalmente preenchida (como Na, Al), ou ainda por apresentar sua última banda totalmente preenchida, mas com uma sobreposição com a banda seguinte (caso Mg). A Fig. 6 mostra os diagramas de banda esquemáticos dos metais Na, Mg e Al. O Na apresenta metade da banda 3s ocupada (1 elétron de cada átomo de Na). No caso de Mg, a banda 3s está totalmente preenchida, porém há uma sobreposição entre as bandas 3s e 3p, resultando numa banda maior e não totalmente preenchida. No caso do Al, a banda 3s está totalmente preenchida e a banda 3p parcialmente preenchida.

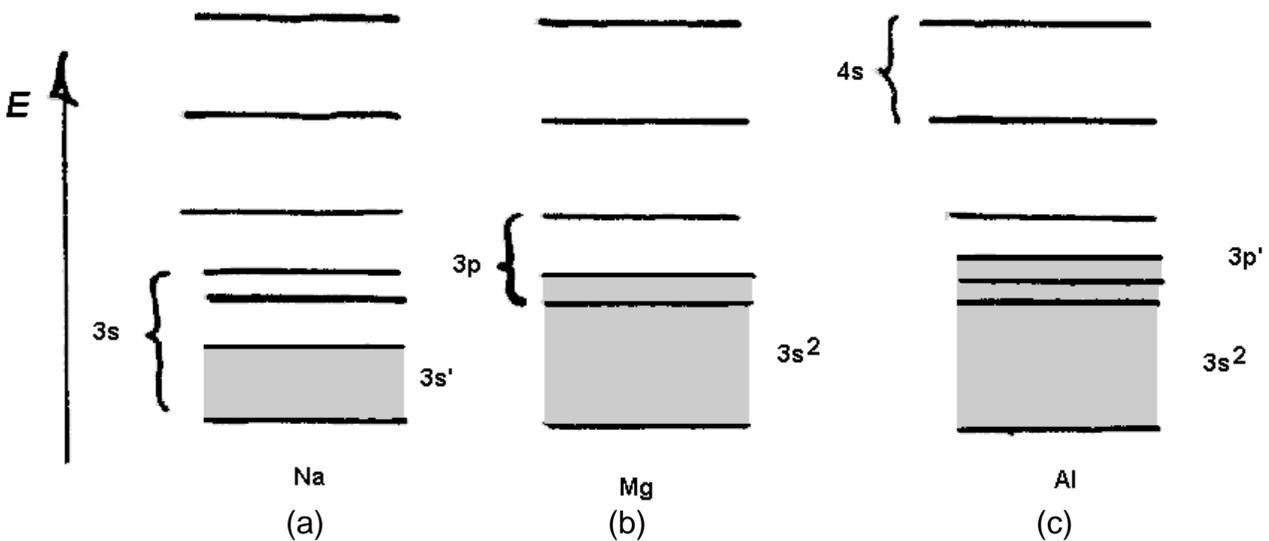


Fig. 6 Diagramas de bandas de energia de alguns metais: (a) Na, (b) Mg e (c) Al.

b) Isolantes: são materiais que tem sua última banda, chamada de valência, totalmente preenchida, sem sobreposição com a banda de energia seguinte e além disto, uma banda proibida de valor considerável. Uma banda proibida larga é necessária para que seja improvável um elétron da banda de valência adquirir energia e passar para a banda seguinte de condução. A Fig. 7 ilustra a diferença básica entre os diagramas de bandas de materiais condutores e isolantes.

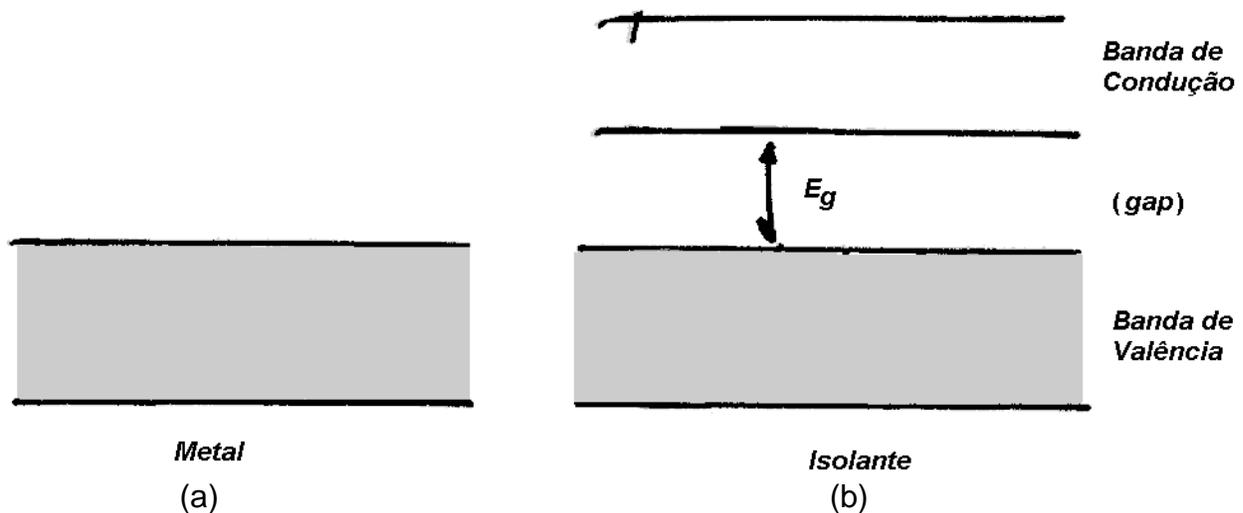


Fig. 7 Diagramas de banda de energia típicos: (a) de metais e (b) de isolantes

c) Semicondutores: Semicondutores são um caso particular de materiais isolantes, sendo a única diferença a magnitude da banda proibida de energia do seu diagrama de bandas (Fig. 7 b). Se for menor ou até da ordem de 3 eV podemos classificá-lo como semicondutor, enquanto que se for maior que este valor o classificamos como isolante. À temperatura de 0 K, tanto o semicondutor como o próprio isolante serão ambos isolantes. Eles não poderão conduzir corrente elétrica, pois em ambos os casos, as bandas de valência encontram-se totalmente preenchidas. Aumentando-se a temperatura, acima de 0 K, de um material semicondutor, com largura da banda proibida reduzida, alguns poucos elétrons da banda de valência adquirem energia térmica da rede e poderão pular dos seus estados da banda de valência para estados vazios da banda de condução. Desta forma, passamos a uma condição em que os elétrons, tanto da banda de valência (banda não mais totalmente preenchida) como da banda de condução (apenas parcialmente preenchida), podem conduzir corrente elétrica. A condutividade será no entanto bem reduzida, tendo em vista o número reduzido de elétrons na banda de condução, bem como uma banda de valência ainda quase preenchida. Esta situação no entanto não ocorre em materiais isolantes que tenham largura da banda proibida de valor grande o suficiente, a não ser que elevemos muito a temperatura. A Tabela 7.1 apresenta alguns materiais com a largura da sua banda proibida e a sua correspondente classificação como isolante ou semicondutor.

Tabela 7.1 Exemplos de materiais com sua respectiva largura da banda proibida (E_G) e classificação como isolante ou semicondutor.

Material	E_G [eV] a 300 K	Classificação
Ge	0.66	Semicondutor
Si	1.12	Semicondutor
GaAs	1.42	Semicondutor
C (diamante)	5.47	Isolante
SiO ₂	9.0	Isolante
Si ₃ O ₄	5.0	Isolante

3 Lacunas

Lacunas referem-se a estados da banda de valência vazios, não preenchidos por elétrons. Elas são também chamadas por buracos ou *holes* em Inglês. Veremos que a lacuna pode ser tratada como uma partícula de carga positiva, e que esta sua característica deve-se ao comportamento estranho dos demais elétrons da banda de valência onde se encontra a lacuna. Na realidade a lacuna não existe como partícula ou como entidade isolada, mas ela é uma consequência do movimento de elétrons num potencial periódico. Assim, a lacuna livre não existe. Não é possível criar um canhão de lacunas como existe para elétrons. Lacunas resultam de um artifício matemático que mostraremos a seguir.

Define-se a massa efetiva pela seguinte relação:

$$m^* = \hbar^2 \left(\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \right)^{-1} \quad (1)$$

Temos pela substituição correspondente do termo de massa efetiva

$$\frac{dI}{dt} = q \in \sum \frac{1}{m_i^*} \quad (2)$$

onde a somatória representa a somatória do inverso das massas efetivas correspondentes a todos os estados ocupados. Baseado nesta relação, analisemos os seguintes casos:

a) supondo uma banda que tenha um único estado ocupado. Neste caso teremos:

$$\frac{dI_e}{dt} = \frac{q^2 \in}{m^*} \quad (3)$$

b) supondo agora o caso de uma banda totalmente cheia, teremos que a corrente deve ser nula:

$$\frac{dI}{dt} = q^2 \in \sum_i \frac{1}{m_i^*} = 0 \quad (4)$$

c) tendo uma banda totalmente cheia com exceção de um único estado no topo da banda, ou seja, caso de uma banda com uma única lacuna. Neste caso teremos:

$$\frac{dI_h}{dt} = q^2 \in \sum_{i,i \neq j} \frac{1}{m_i^*} \quad (5)$$

mas temos da relação 4 que:

$$q^2 \in \left(\sum_{i,i \neq j} \frac{1}{m_i^*} + \frac{1}{m_j} \right) = 0 \quad (6)$$

Das relações 5 e 6 resulta que:

$$\frac{dI_h}{dt} = -q^2 \in \frac{1}{m_j^*} \quad (7)$$

Devemos lembrar da Fig. 4 que, na parte inferior da banda os estados apresentam massa efetiva positiva, enquanto que os estados da metade superior da banda apresentam massa efetiva negativa. As lacunas correspondem normalmente a estados desocupados na parte superior da banda (minimização da energia dos elétrons) e portanto apresentam massa efetiva negativa. Assim podemos considerar o módulo da massa efetiva da lacuna e inverter o sinal da relação 7, resultando:

$$\frac{dI_h}{dt} = q^2 \in \frac{1}{|m_j^*|} \quad (8)$$

A troca do sinal da massa e da expressão da corrente equivale a tratar a lacuna como sendo uma partícula de massa efetiva e carga q , de sinais positivos.

Pelo exposto acima, podemos concluir que a condução através dos elétrons, de uma banda de valência quase cheia de um cristal, é equivalente à condução através de partículas fictícias, correspondendo aos estados desocupados e de massa efetiva negativa, chamadas lacunas, as quais se comportam como se fossem partículas de carga e massa de sinais positivos. Uma analogia à corrente elétrica por lacunas é o caso de uma bolha caminhando na água. A bolha é uma ausência de água, sendo que seu deslocamento corresponde na verdade ao movimento de água em sentido oposto. Embora seja a lacuna uma partícula fictícia que não existe na realidade, um engenheiro pode adotá-la como sendo uma partícula real para efeitos práticos, de uso na análise de dispositivos.

Lembremos que um semicondutor a uma temperatura superior a 0 K, apresenta um certo número de elétrons na banda de condução, criados concomitantemente com os estados vazios ou lacunas na banda de valência. Desta forma, o semicondutor terá uma corrente elétrica, se for aplicado um campo elétrico, dada pela soma da condução dos elétrons na banda de condução e das lacunas na banda de valência. Por este motivo chamaremos daqui para frente os elétrons e as lacunas de portadores. Isto significa que temos 2 tipos de portadores, elétrons na banda de condução, com carga $-q$ e lacunas na banda de valência, com carga $+q$. A massa efetiva de cada portador depende da particular curvatura da relação $E \times k$, do respectivo diagrama de banda. Assim, a massa efetiva pode diferir para elétron e lacuna e para materiais diferentes, como veremos no item seguinte.

4 Diagramas de Bandas de Semicondutores Reais

Até este ponto do capítulo, desenvolvemos nosso modelo considerando um cristal hipotético unidimensional. Isto foi motivado pela maior facilidade do tratamento matemático e por ser suficiente para a apresentação dos conceitos importantes introduzidos. No caso de um cristal real tridimensional, os cálculos são bem mais complexos e a sua apresentação está fora do escopo deste texto. Mas de forma geral todos os conceitos discutidos nos itens anteriores são similares e válidos para os cristais reais. A Fig. 8 apresenta diagramas de bandas reais correspondentes a 3 cristais semicondutores de interesse prático. As curvas representam os estados permitidos determinados pela solução da equação de Schrödinger independente do tempo, tendo como potencial eletrostático o potencial periódico do cristal (no caso da soluções da Fig. 8, em 2 direções). Nos gráficos considerou-se como energia de referência a energia do topo das bandas de valência dos materiais. As curvas obtidas apresentam detalhes e valores que foram confirmados por diferentes medidas elétricas, magnéticas e ópticas, realizadas por diversos grupos de pesquisa e reportados na literatura científica internacional.

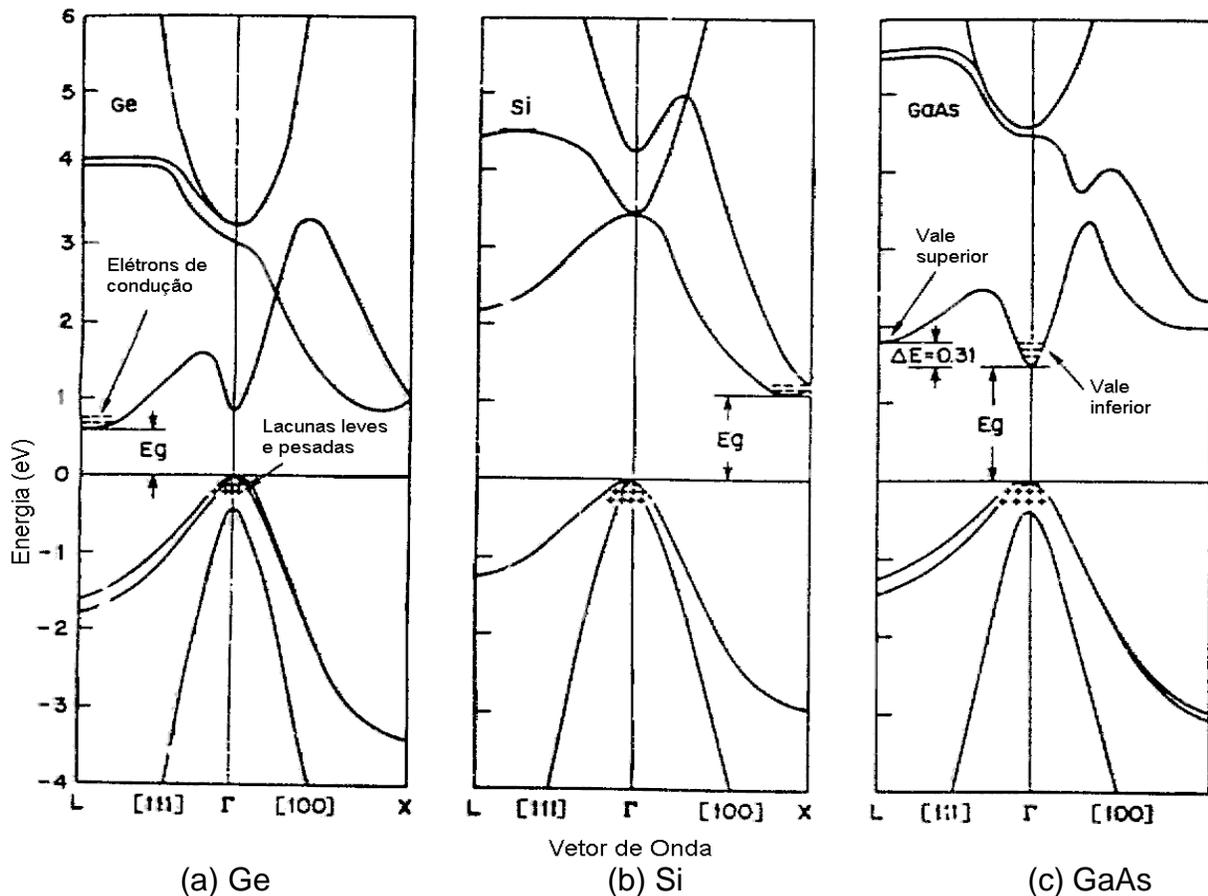


Fig. 8 Estruturas de diagramas de bandas reais de semicondutores comuns, (a) Ge, (b) Si e (c) GaAs. E_G representa a largura da banda proibida. Os sinais + no topo das bandas de valência e - no vale inferior da banda de condução representam respectivamente lacunas e elétrons nestes estados.

Analisando os diagramas de bandas dos semicondutores da Fig. 8 temos as seguintes questões:

- o mínimo da banda de condução do diagrama de bandas do GaAs corresponde ao mesmo valor de vetor de onda do estado do máximo da banda de valência. Isto significa que, para um elétron “pular” da banda de valência para a banda de condução, ou vice-versa, basta ele receber ou emitir um quantum de energia, dado por E_G correspondente, sem necessitar mudar o valor do seu vetor de onda, associado ao momentum do elétron. Este tipo de caso é chamado de diagrama de bandas tipo direto. A transição de um elétron de um estado com apenas troca de energia, sem troca de momentum, é mais fácil ou provável de ocorrer comparado ao caso onde há necessidade de troca das duas grandezas ao mesmo tempo. Como consequência, este tipo de diagrama de banda do tipo direto é requerido para que o material tenha boas propriedades optoeletrônicas (necessário para Laser, LED, outros).
- no caso dos semicondutores de Ge e Si temos o caso de diagrama de bandas do tipo indireto. Isto está associado ao fato do máximo da banda de valência não coincidir no mesmo ponto do valor do vetor de onda k do estado do mínimo da banda de condução. Neste caso, a transição de um elétron entre a banda de valência e a banda de condução requer não apenas uma troca de energia mas sim ao mesmo tempo uma troca de momentum do elétron. Para o elétron trocar de momentum, ele deve interagir com uma outra partícula, como por exemplo um fónon (vibração de átomo da rede), para trocar momentum, e ao mesmo tempo com um fóton para receber ou emitir energia. Por esta razão, a transição do elétron entre as duas bandas é mais difícil de ocorrer em materiais com estrutura de bandas do tipo indireto, sendo estes materiais não apropriados para a fabricação de dispositivos optoeletrônicos.
- lembrando que a massa efetiva associada aos estados é dada pelo inverso da derivada segunda das curvas $E \times k$, conclui-se que, quanto mais fechada a curvatura, menor a massa efetiva. Comparando as curvas nas regiões dos mínimos das bandas de condução dos 3 materiais da Fig. 8, observa-se que a massa efetiva do elétron no GaAs deve ser menor que as massas efetivas dos elétrons no Ge e do Si. Analisando as curvaturas nas regiões dos máximos das curvas de valência, observa-se que existem duas ou três curvas para cada material e com curvaturas diferentes, correspondendo a lacunas de massas distintas, uma mais leve e a outra mais pesada.
- No diagrama de bandas do GaAs observa-se que o mínimo da banda de condução ocorre em torno do vetor de onda $k = 0$. Porém, a curva apresenta um segundo mínimo em outro valor de k , com uma energia de 0.31 eV acima do mínimo principal. Se por algum mecanismo, um elétron ocupando um estado no mínimo principal, receber energia e assim passar a um estado do segundo mínimo, ele sofrerá uma alteração (aumento) significativa da sua massa efetiva. Isto pode significar uma redução na condutividade do material (resistência negativa).

Da análise acima podemos concluir que várias das propriedades dos semicondutores podem ser extraídas dos respectivos diagramas de bandas. Daí a importância do conhecimento dos conceitos apresentados neste capítulo. Em algumas análises das propriedades dos semicondutores não necessitamos de todas as informações disponíveis nos diagramas completos como apresentados na Fig. 8. Em alguns casos basta considerar apenas a diferença entre os níveis de energia do máximo

da banda de valência e o mínimo da banda de condução, sem preocupar-se com o valor do vetor de onda correspondente. Neste caso, basta representar o diagrama de bandas na sua forma simplificada como mostrado na Fig. 9. No capítulo seguinte faremos uso freqüente desta representação.

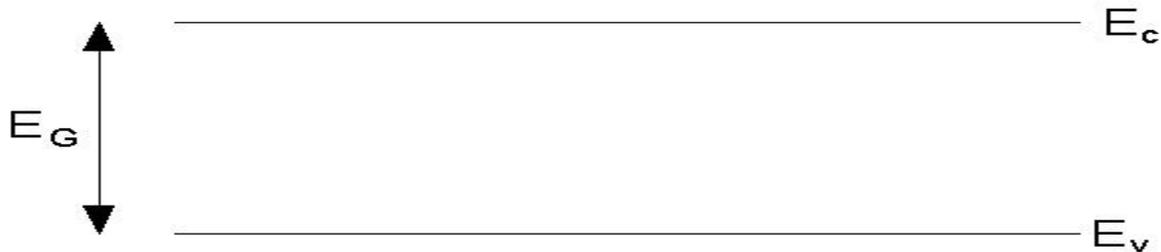


Fig. 9 Diagrama de bandas simplificado de semicondutores.

5 Distribuição de Portadores em Temperatura Finita

No caso de temperatura de 0 K, temos que a matéria ocupa os estados de mais baixa energia possível. Todos os elétrons irão ocupar os estados quânticos de mais baixa energia. No caso de semicondutores temos a banda de valência totalmente preenchida por elétrons e a banda de condução totalmente vazia com todos os estados desocupados. A pergunta que segue este comportamento é como fica a situação de ocupação dos estados, nos materiais em geral, quando aumentamos a temperatura do mesmo? A resposta pode ser obtida se considerarmos a função estatística de probabilidade de ocupação dos estados, de Fermi-Dirac. Esta função mostra que, quando aumentamos a temperatura, sua variação deixa de ser abrupta em $E = E_F$ (energia de Fermi), de forma que nem todos os estados com energia abaixo de E_F permanecem ocupados e nem todos os estados com energia acima de E_F ficam desocupados, como era a situação para $T = 0$ K. Analisaremos o efeito desta alteração da probabilidade com a temperatura em metais, isolantes e semicondutores:

a) Em metais: estes apresentam um efeito relativamente reduzido com a variação da temperatura. Teremos uma redistribuição dos elétrons nos estados da sua banda de valência, sendo que o mesmo continuará apresentando características de boa condutividade elétrica e térmica, além de permanecer um material opaco. Teremos sim, variação do calor específico e efeitos termiônicos.

b) Em isolantes: estes apresentam um efeito relativo menor ainda. Aumentando-se a temperatura, o número de portadores, lacunas na banda de valência e elétrons na banda de condução, continuará sendo nulo. Isto significa que o material permanece sendo isolante mesmo aumentando-se a temperatura.

c) Em semicondutores: estes apresentarão relativamente a maior variação no seu comportamento ao aumentarmos sua temperatura acima de $T = 0$ K. No caso de $T = 0$ K, temos a função de Fermi-Dirac e o diagrama de banda simplificado do material como mostrado na Fig. 10 a, com a função de Fermi-Dirac variando abruptamente entre 1 e 0 para $E = E_F$, localizado entre os níveis de valência e de condução; número nulo de

elétrons na banda de condução e também um número nulo de lacunas na banda de valência. Esta situação modifica-se ao aumentarmos a temperatura, como mostra a Fig. 10 b. Nesta situação teremos que a função de Fermi-Dirac torna-se mais gradual e como conseqüência, ela deixa de ser 0 para energia acima de E_c (mínimo da banda de condução) e deixará de ser 1 para energia abaixo de E_v (máximo da banda de valência). Isto significa que teremos alguns poucos elétrons na banda de condução e umas poucas lacunas na banda de valência. Esta situação já havia sido discutida no item 7.7, porém sem o emprego da função estatística de ocupação dos estados. Concluimos assim novamente que, um material tipo semiconductor comporta-se como um isolante à temperatura $T = 0$ K e passa a comportar-se como um semiconductor apenas com temperatura acima de 0 K. É fácil imaginar pela Fig. 9 b, que quanto menor o valor de E_G , maior será a concentração de elétrons na banda de condução e de lacunas na banda de valência.

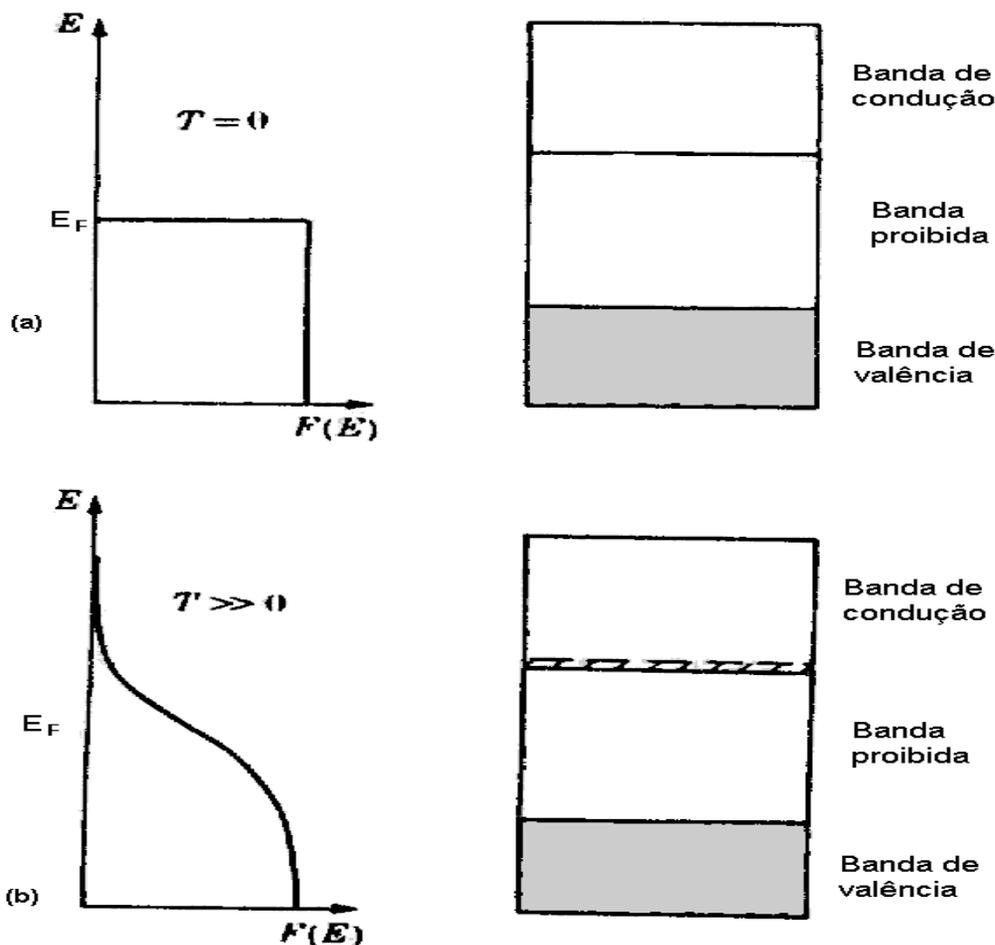


Fig. 10 Função de Fermi-Dirac e diagrama de bandas de um semiconductor : (a) à temperatura de 0 K, sem portadores nas bandas de valência e de condução e (b) a uma temperatura bem maior que 0 K, com igual número de elétrons na banda de condução e de lacunas na banda de valência.

6. Funções Estatísticas de Ocupação dos Estados Quânticos:

A determinação da densidade de estados em função da energia é uma parte da solução do nosso problema. A segunda parte refere-se a determinar quantos e quais destes estados estarão ocupados por elétrons numa dada temperatura. Esta questão é tratada pela mecânica estatística. A probabilidade de ocupação de estados quânticos segue a função chamada de “função de distribuição de Fermi-Dirac”, que foi desenvolvida considerando as seguintes condições, que se aplicam no caso dos elétrons:

- o princípio de exclusão de Pauli
- as partículas são todas idênticas
- o número total de partículas é conservada
- a energia total do sistema é conservada

A função estatística obtida com estas condições é dada como:

$$f(E) = \frac{1}{1 + e^{(E-E_F)/kT}} \quad (9)$$

onde: E_F é uma energia de referência, chamado de nível de Fermi,
 k = constante de Boltzmann = 1.38×10^{-23} J/K = 8.62×10^{-5} eV/K

Observa-se facilmente a seguinte propriedade desta função:

$$f(E_F) = \frac{1}{2} \quad (10)$$

Desta propriedade podemos também afirmar que o nível de referência, ou de Fermi, é o nível de energia onde a probabilidade de ocupação é 0.5. A Fig. 11 mostra curvas correspondentes à função de Fermi-Dirac para 3 temperaturas, 0 K, 600 K e 6000 K. Observa-se que a função varia de 1 a 0, aumentando-se a energia. No caso da temperatura de 0 K, a função é abrupta em $E = E_F$. Quanto maior a temperatura, mais gradual torna-se a variação da função. Este comportamento da função está de acordo com as observações físicas. A 0 K todos os elétrons buscam ocupar os estados de mínima energia, ou seja, os elétrons ocuparão todos os estados até um certo nível de energia, no caso E_F . Assim, o número total de estados com energia menor que este nível deve ser igual ao total de elétrons no sistema e a probabilidade de ocupação destes estados é um. Todos os estados com energia acima do nível E_F estarão desocupados e portanto com probabilidade de ocupação zero. Ao aumentarmos a temperatura do material, alguns dos elétrons receberão energia térmica, a partir da vibração da rede de átomos. Desta forma, estes elétrons irão ocupar estados de energia quântica maior, deixando o seu estado original desocupado. Isto explica porque a função de Fermi-Dirac torna-se mais gradual pelo aumento da temperatura.

A Fig. 11 (b) mostra uma outra função estatística, chamado de Maxwell-Boltzmann, que se aplica a casos de sistemas diluídos (muitos estados e poucas partículas) onde:

- as partículas são consideradas distintas
- o número total de partículas é conservado
- a energia total do sistema é conservada

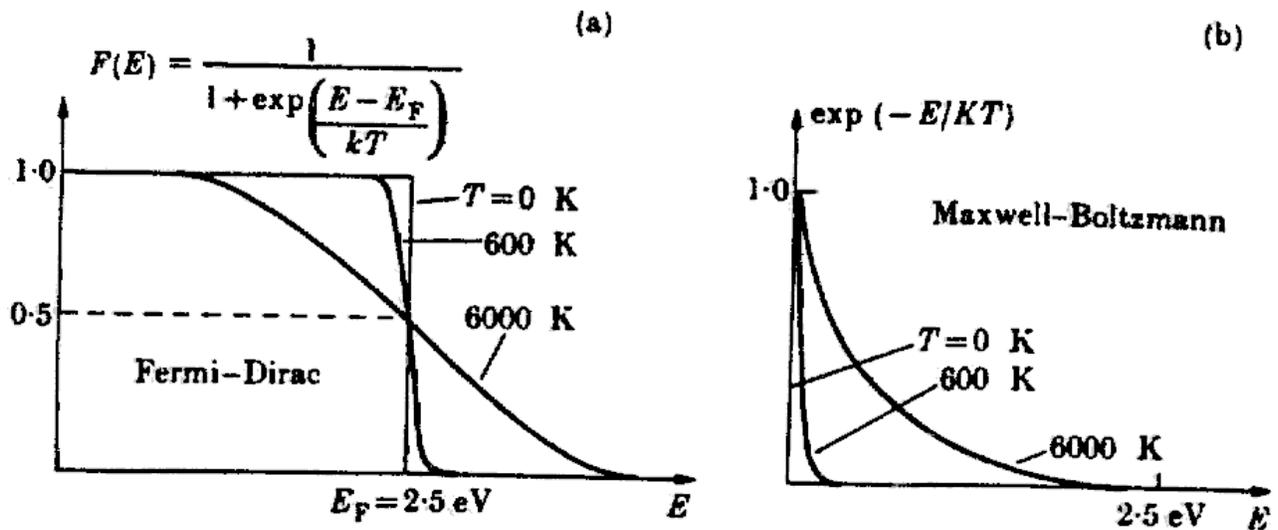


Fig. 11 (a) A função de probabilidade de Fermi-Dirac para temperaturas de 0 k, 600 k e 6000 k ; (b) A função de probabilidade clássica de Maxwell-Boltzmann para as mesmas temperaturas.

A função estatística desenvolvida para este caso de sistema é:

$$f(E) = e^{-(E-E_F)/kT} \tag{11}$$

Estritamente, nunca poderíamos usar a estatística de Maxwell-Boltzmann para descrever a probabilidade de ocupação de estados quânticos por elétrons, dado que esta estatística não obedece ao princípio de exclusão de Pauli. Porém, quando a energia dos estados considerados for bem maior que o nível de Fermi, a probabilidade de ocupação torna-se próximo a zero. Nesta situação, o princípio de exclusão de Pauli deixa de ser uma restrição, dado que temos muitos estados e baixa probabilidade de ocupação. A probabilidade é tão baixa que não haverá competição entre elétrons para ocuparem um mesmo estado, correspondendo portanto a um sistema diluído. É fácil verificar que matematicamente, a função de Fermi-Dirac (9) pode ser aproximada à função Maxwell-Boltzmann (11) quando $E - E_F \gg kT$. A Fig. 11 apresenta as curvas das funções de Fermi-Dirac e Maxwell-Boltzmann, mostrando que ambas se aproximam para altas energias, ou seja, para $E - E_F \gg kT$. A título de informação, a Fig. 12 apresenta também a curva da função estatística de Bose-Einstein. Esta função nunca se aplica a sistema de elétrons, mas sim ao caso em que valem as mesmas hipóteses da estatística de Fermi-Dirac, com partículas idênticas, com exceção da hipótese do princípio de exclusão de Pauli. Estas hipóteses aplicam-se a um sistema de partículas como fótons.

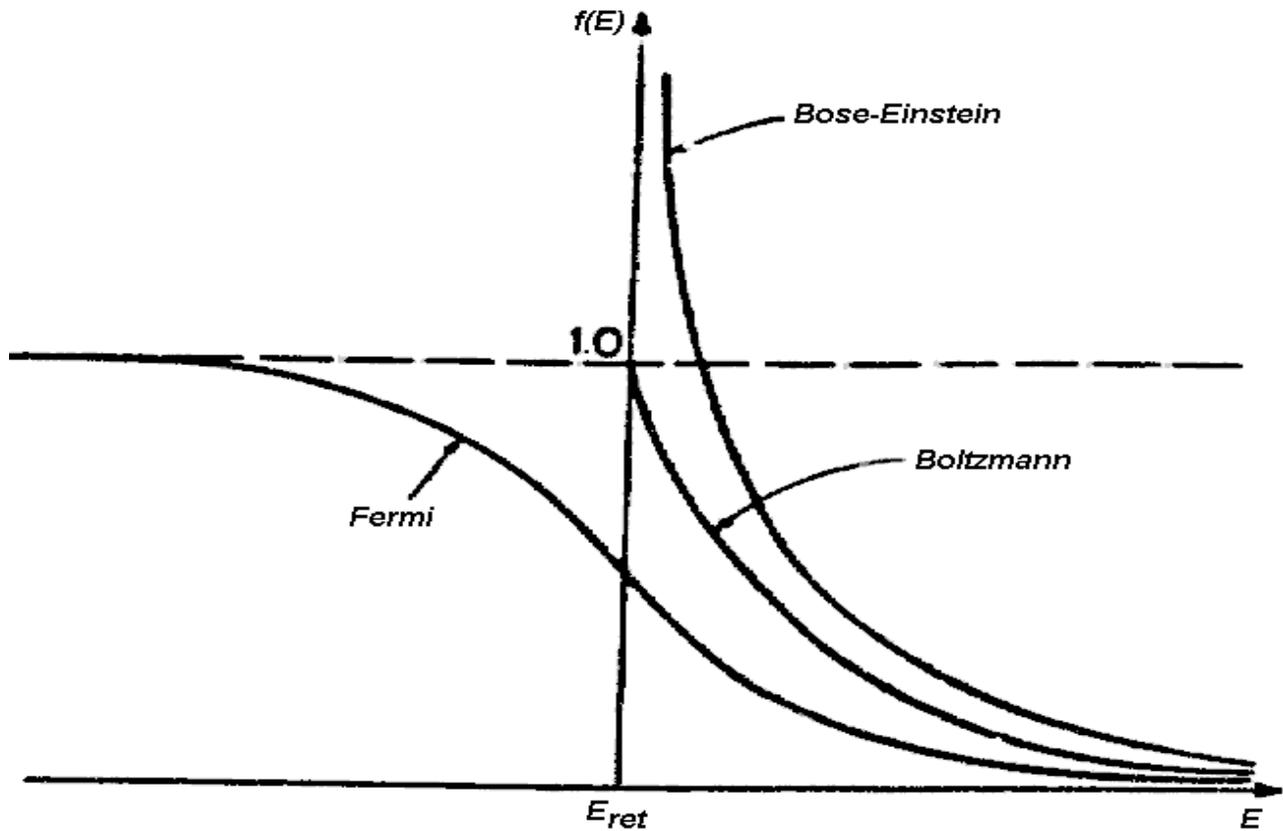


Fig. 12 Comparação entre as curvas das funções de probabilidades de Fermi-Dirac, Maxwell-Boltzmann e Bose-Einstein.

É importante frisar que as funções estatísticas correspondem às descrições das distribuições mais prováveis das partículas nos estados quando o sistema está em equilíbrio. Estas funções não se aplicam a casos de sistemas fora do equilíbrio.

No caso de estados com energias altas, ou seja, $E - E_F \gg kT$, poderemos usar a estatística de Maxwell-Boltzmann, como já foi detalhado acima.

c) No caso de estados com energias baixas tal que $E_F - E \gg kT$ podemos aproximar a função de Fermi-Dirac (9) como sendo:

$$f(E) \cong 1 - e^{(E - E_F)/kT} \quad (12)$$

Aqui a probabilidade de ocupação do estado é próximo a 1. Nesta situação é conveniente definir a probabilidade do estado estar desocupado como sendo (a partir de 12):

$$1 - f(E) \cong e^{(E - E_F)/kT} \quad (13)$$

Esta função de probabilidade de desocupação do estado, para $E_F - E \gg kT$, apresenta-se também na forma da função de distribuição de Maxwell-Boltzmann (11).

Nos casos em que os níveis de energia dos estados não forem distantes suficiente do nível de Fermi, não poderemos usar as aproximações dos casos acima, e teremos que obrigatoriamente usar a função de Fermi-Dirac como a função de probabilidade de ocupação dos estados. Podemos calcular por exemplo, em que faixa de energia a função de Fermi-Dirac varia entre 0.9 e 0.1. Fazendo este cálculo pela relação 9, obtemos $\Delta E = 4.4 \text{ kT}$. Nesta faixa com certeza não poderíamos usar a aproximação descrita. Se quisermos ser mais restritos ainda, poderíamos tomar como intervalo de 6.0 kT , o intervalo no qual não aceitamos a aproximação da função de Fermi-Dirac para a função de Maxwell-Boltzmann. Neste limites teremos a função de Fermi-Dirac variando entre 0.95 e 0.05.