

CONDUÇÃO ELÉTRICA NOS SÓLIDOS: ABORDAGEM CLÁSSICA E QUÂNTICA

Electrical conduction in the solids: approach Classical and Quantum

Ronni Geraldo Gomes de Amorim¹, Vinícius Carvalhaes^{2***}, Philippe Dias Araújo¹, Eberth de Almeida Corrêa¹, Caio M. Polito^{3**} e Washington Barbosa da Silva^{4*}

¹Universidade de Brasília, Faculdade Gama, 72444-240, Brasília, DF, Brasil; ²Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Goiás, Campus de Goiânia, 74055-110, GO, Brasil; ³Colégio Militar de Brasília, Asa Norte, 70790-020, Brasília, DF, Brasil; ⁴Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Goiás, Campus de Luziânia, 72811-580, Luziânia, GO, Brasil

*E-mail: wassestf@gmail.com, **E-mail: mp.caio@gmail.com, ***E-mail: profviniciuscarv@gmail.com

Resumo – Neste trabalho, estudamos a condução elétrica nos sólidos segundo a abordagem da física clássica e da física quântica. Uma comparação entre as duas abordagens nos ensina que o eletromagnetismo clássico não explica questões elementares do tema em questão, como por exemplo sua aplicação em semicondutores. Também apresentamos uma análise qualitativa da supercondutividade, onde discutimos alguns aspectos da teoria microscópica utilizada em supercondutores.

Palavras-chave – condução elétrica, semicondutores, supercondutores.

Abstract – In this work we study electrical conduction in solids based in approach of classical physics and quantum physics. A comparison between two approaches teaches us that the classical electromagnetism doesn't explain basic questions about electrical conduction, such as semiconductors. We also present a qualitative analyses about superconductivity where we discuss some aspects of microscopic theory that describes the superconductors.

Key-Words – electrical conduction, semiconductors, superconductors.

I. INTRODUÇÃO

O trabalho diário de um engenheiro envolve a geração e aplicação do conhecimento que relaciona tanto a composição, a sua estrutura, bem como o processamento de materiais, com as suas propriedades e a sua aplicação [1,2]. Nesse contexto, cabe aqui citar um princípio elementar da ciência de materiais: “as propriedades de um material originam-se na sua estrutura interna”, ou colocando de uma outra forma: existe uma

íntima relação entre propriedade e estrutura do material [3]. Aliados a esse princípio, podemos afirmar que o engenheiro, durante a sua formação, deve ter acesso a informações que o possibilite conhecer em detalhes os materiais e, a partir destes pormenores, compreenderem o comportamento da matéria em diversas situações. Porém, o conhecimento holístico dos materiais requer tratamentos que sejam ao mesmo tempo minuciosos e abrangentes; assim, é necessário que a análise do material utilize ferramentas pertinentes a distintas áreas da física, como por exemplo a física clássica e a mecânica quântica, sendo que esta última é extremamente importante quando o objetivo é entender a microestrutura dos materiais.

Caminhando nesse sentido, não podemos deixar de considerar a condução elétrica como uma propriedade dos materiais que desempenha uma forte influência nos projetos de engenharia. Percebemos esse fato quando observamos a vasta aplicação de materiais semicondutores nos dispositivos eletrônicos, nas placas fotovoltaicas para a geração de energia solar e a crescente utilização dos supercondutores em áreas como medicina e transporte⁴. A partir deste ponto, vemos que o interesse do engenheiro em assuntos relacionados à condução elétrica nos sólidos vem crescendo com o passar dos anos, simplesmente pelo fato desse profissional trabalhar com uma vasta quantidade de materiais utilizados em equipamentos e componentes, tanto elétricos quanto magnéticos, e nesse cenário surge a necessidade de correlacionar as propriedades dos metais, ligas, materiais

cerâmicos, semicondutores, plásticos e outros tipos de polimerizados com suas propriedades estruturais.

Portanto, um estudo um pouco mais avançado sobre o processo de condução elétrica dos sólidos pode auxiliar o engenheiro no desenvolvimento de suas competências. Como um exemplo de aplicação do tema condução elétrica, destaca-se uma pesquisa recente realizada no Centro de Engenharia de Nano-produtos da Fundação Educacional Inaciana Padre Saboia de Medeiros (FEI), a qual mostrou que cabos de alumínio com nano-tubos reduzem perdas de eletricidade. Essa descoberta muito provavelmente influenciará a forma com que hoje a energia elétrica é conduzida a partir das hidroelétricas até as nossas residências, reduzindo drasticamente as perdas de energia que ocorrem no processo de transmissão. Para termos uma ideia, as perdas por distribuição das fontes hidráulicas e eletricidade estão na casa dos 23%, segundo os resultados preliminares do Balanço Energético Nacional do ano base 2010.

Com isso, a pesquisa acima citada deixa de ter um viés estritamente tecnológico e volta-se também para o paradigma ambiental. O projeto desenvolvido pela FEI é amparado pela nanotecnologia, e necessitou de um estudo detalhado do processo de condução elétrica nos nano-tubos de carbono, que apresentam um mecanismo diferente de condução eletrônica. Notamos ainda (mediante o exemplo destacado) que o conhecimento detalhado sobre o processo condução elétrica é essencial para o trabalho eficaz do engenheiro, principalmente em formação. Além disso, é essencial que não se perca de vista o papel fundamental que os estudos sobre condução elétrica exerceram no desenvolvimento da informática, uma vez que o entendimento da estrutura quântica dos semicondutores permitiu o desenvolvimento do transistor que, por sua vez alavancou o poder dos computadores na sociedade [5].

Nesse sentido, este artigo traz como uma proposta, aos professores dos cursos de engenharia, a sugestão para apresentarem a o assunto sobre a condução elétrica aos seus estudantes, por meio de uma abordagem pedagógica bem mais completa. A perspectiva apresentada neste trabalho apresenta a condução elétrica a partir dos pontos de vista clássico e

quântico, oferecendo ao aluno a possibilidade de analisar as vantagens e desvantagens de cada abordagem.

O formalismo matemático é de fácil acesso, necessitando como pré-requisitos somente conhecimentos de cálculo diferencial e integral e de equações diferenciais. O presente artigo também pretende quebrar a forma dicotômica que o tema abordado é tradicionalmente apresentado nas disciplinas dos cursos de engenharia, pois, na maioria das vezes, as abordagens clássica e quântica são atribuídas a disciplinas distintas e as correlações entre tais abordagens deixam de ser feitas, perdendo-se assim o caráter complementar que ambas possam revelar.

Dessa forma, os autores sugerem a apresentação do conteúdo deste artigo nas disciplinas dos cursos de engenharia mecânica, engenharia civil, engenharia elétrica, engenharia de software e engenharia de materiais. Em particular, recomendam o uso deste material, de forma complementar, na disciplina comumente intitulada “Ciência e Engenharia dos Materiais”, tendo em vista a forma pedagógica como foi apresentado o tema, com vínculos estabelecidos entre os conteúdos, formulação didática e exemplos de aplicação em situações práticas da engenharia.

II. MATERIAIS E MÉTODOS

Este trabalho foi realizado por meio de uma pesquisa bibliográfica, que incluiu livros didáticos e artigos científicos da área. O assunto foi abordado de maneira que o leitor pudesse ter uma melhor compreensão analítica do tema. Para isso, foram utilizados dados coletados na literatura através de gráficos e tabela, com o claro objetivo de fornecerem um maior suporte à pesquisa.

III. RESULTADOS E DISCUSSÃO

3.1. Abordagem clássica

Nesta seção, estudaremos a condução elétrica do ponto de vista clássico. Notaremos que, apesar da simplicidade do modelo proposto, a conveniência da adoção dessa abordagem se justifica pela efetiva validade de sua aplicação

em certas situações [3,4,5]. Com esse intuito, consideraremos que no interior da maioria dos materiais sólidos, alguns elétrons dos átomos se desprendam e venham a se movimentar livremente através do material. O movimento destes elétrons promove uma transferência da carga elétrica através do material, fenômeno conhecido como condução elétrica. Tendo em vista que os núcleos desses átomos são carregados positivamente, os demais elétrons continuam presos à eles. Assim, definimos a corrente como sendo o movimento da carga e o processo pelo qual a carga é transportada, denominamos condução. Matematicamente, a corrente I , é definida como a taxa temporal, segundo a qual a carga é transportada através de uma dada superfície em um sistema condutor. Assim

$$I = \frac{\Delta Q}{\Delta t}, \quad (1)$$

onde Q é a carga líquida transportada em um tempo t . De um ponto de vista mais conceitual, podemos considerar a corrente elétrica como sendo o movimento das partículas eletricamente carregadas em resposta a forças externas que atuam sobre elas.

Em um metal, onde os átomos estão dispostos em uma estrutura cristalina, a corrente é totalmente conduzida pelos elétrons, enquanto os íons positivos pesados estão fixos em posições regulares. Somente os elétrons atômicos de valência estão livres para participar do processo de condução; os outros elétrons estão fortemente ligados aos seus íons. Em condições estacionárias, um excesso de cargas se dissipa com extrema rapidez num condutor. Assim, observamos que é possível estudar a corrente elétrica sem levar em conta a contribuição detalhada dos efeitos eletrostáticos, associados com os portadores de cargas.

Consideremos agora um meio condutor no qual haja apenas um tipo de portador de carga, simbolizado por q . O número destes portadores por unidade de volume será representado por N . Sem perda de generalidade, negligenciaremos seu movimento térmico aleatório e associaremos a mesma velocidade de deslocamento v a cada

portador. Calcularemos a corrente através de um elemento de área da . Durante o tempo δt cada portador percorre uma distância $v\delta t$. Assim, percebemos que a carga δQ que atravessa da durante o tempo δt é obtida simplesmente pela multiplicação da carga q pelo resultado da soma de todos os portadores de carga no volume $v \cdot n\delta t da$, onde n é o vetor unitário normal à área da . Dessa forma, utilizando a equação (1), temos, como elemento de corrente:

$$dI = \frac{\delta Q}{\delta t} = Nqv \cdot nda. \quad (2)$$

Ao considerarmos a presença demais de uma espécie de portadores de carga, teremos:

$$dI = \left[\sum_i N_i q_i v_i \right] \cdot nda. \quad (3)$$

A quantidade entre parêntesis é denominada densidade de corrente, que por sua vez representaremos por J . Assim, a equação (3) poderá ser reescrita como:

$$dI = J \cdot nda. \quad (4)$$

Agora, a corrente total que passa através de uma superfície S é dada por

$$I = \int_S J \cdot nda. \quad (5)$$

O resultado experimental nos informa que a densidade de corrente J , em metal, e à temperatura constante, satisfaz à equação

$$J = \sigma E, \quad (6)$$

ou seja, a densidade de corrente é proporcional ao campo elétrico, e essa proporcionalidade é conhecida como lei de Ohm. A constante de proporcionalidade σ é denominada condutividade. A equação (6) possui uma validade para uma grande quantidade de

materiais condutores, sendo tais materiais denominados meios ôhmicos.

O inverso da condutividade é chamado de resistividade ρ , assim temos

$$\rho = \frac{1}{\sigma}. \quad (7)$$

Como um exemplo prático, tomemos os valores da resistividade do alumínio $\rho_{Al} = 2,65 \cdot 10^{-8} \Omega m$, do enxofre $\rho_S = 2 \cdot 10^{15}$ e do Silício $\sim 0,1 \Omega m$ todos a $20^\circ C$. Percebemos que o alumínio é classificado como um condutor, pois possui uma baixa resistividade, enquanto o enxofre é classificado como isolante, já que possui uma resistividade elevada, enquanto o Silício é classificado como um semiconductor. Portanto, percebemos que os materiais sólidos podem ser classificados de acordo com a magnitude de sua condutividade elétrica em três grupos: condutores, isolantes e semicondutores. Na tabela a seguir (tabela I) podemos verificar, a título de exemplo, os valores da condutividade elétrica de alguns materiais metálicos.

Tabela 1. Condutividade Elétrica de Alguns Materiais Metálicos (Fonte: Callister – *Materials Science and Engineering*)

Material Metálico	Condutividade Elétrica (Ωm) ⁻¹
Prata	$6,8 \cdot 10^7$
Cobre	$6,0 \cdot 10^7$
Ouro	$4,3 \cdot 10^7$
Alumínio	$3,8 \cdot 10^7$
Ferro	$1,0 \cdot 10^7$
Platina	$0,94 \cdot 10^7$

Agora que já conhecemos alguns conceitos fundamentais dos estudos da condução elétrica, podemos estudar a condução elétrica mediante um modelo microscópico simples de condutor. Para esse fim, consideraremos que o material é constituído por um gás de elétrons que se movem num retículo cristalino formado por íons pesados. Esse modelo prevê a forma correta para a lei de Ohm, mas falha na previsão dos valores da condutividade elétrica de alguns materiais, conforme comparamos aos valores encontrados na literatura corrente.

No que se segue, em uma abordagem clássica, é natural que tenhamos as leis da dinâmica newtonianas como ponto de partida. Portanto, consideraremos uma partícula livre do meio, com carga q e massa m . Além disso, assumiremos que atue sobre a partícula inclusa no material, duas forças: a força elétrica local dada por qE , e uma outra força, agora de resistência (que seja proporcional a velocidade), por sua vez dada por kv . Assim, a segunda lei de Newton pode ser expressa como:

$$m \frac{dv}{dt} = qE - kv. \quad (8)$$

A solução da equação (8) é dada por

$$v(t) = \frac{q}{k} E \left(1 - e^{-\frac{kt}{m}} \right), \quad (9)$$

onde usamos a condição de contorno $v(0) = 0$.

Observando a equação (8), podemos definir o parâmetro $\tau = \frac{m}{k}$. Note que esse parâmetro possui unidade de medida temporal, e por isso o denominamos tempo de relaxação. Assim, podemos escrever para o caso estacionário,

$$v = \frac{q\tau}{m} E,$$

o que nos fornece a densidade de corrente

$$J = \frac{Nq^2\tau}{m} E, \quad (10)$$

quantidade essa proporcional ao campo, como nos informa a lei de Ohm. Dessa forma, percebemos que este modelo baseado no gás de elétrons faz a previsão correta para a dependência entre o campo elétrico e a densidade de corrente.

Ao compararmos a equação (10) com a equação (6), encontramos

$$\sigma = \frac{Nq^2\tau}{m}. \quad (11)$$

No caso de um semicondutor ou de um metal, podemos interpretar τ como o tempo médio de colisão de um elétron de condução e, como esperado, quanto maior a condutividade do material, assumindo N constante, maior também será o tempo médio de colisão entre os elétrons que o constituem. A condutividade é inversamente proporcional à resistividade, sendo assim, os metais constituem o grupo de materiais com menor valor de resistividade e consequentemente, com maior valor da condutividade.

A abordagem clássica que apresentamos até o momento apresenta sucesso em diversos resultados, dentre os quais se destaca a dedução da lei de Ohm. No entanto, a abordagem clássica falha na explicação da capacidade calorífica e da suscetibilidade magnética. Em particular, a abordagem clássica prevê incorretamente os valores observados experimentalmente para a condutividade elétrica. Por exemplo, para o cobre temos: $\sigma_{calculado} = 5,3 \cdot 10^6 (\Omega m)^{-1}$ e $\sigma_{experimental} = 59 \cdot 10^6 (\Omega m)^{-1}$. Outro ponto onde a abordagem clássica não condiz com a experiência aparece no tão conhecido efeito Hall, pois a física clássica prevê que os coeficientes Hall são sempre negativos, enquanto que experimentos mostram que alguns materiais possuem o coeficiente Hall positivo. Além disso, o modelo clássico também falha completamente na explicação das propriedades de isolantes e semicondutores. Perceberemos logo adiante, que para obtermos uma compreensão mais rica e de acordo com os resultados experimentais em relação às propriedades elétricas dos materiais precisaremos considerar o caráter ondulatório dos elétrons e fazer uso dos conceitos da mecânica quântica, o que será estabelecido a partir do próximo capítulo.

3.2. Abordagem quântica

Nosso objetivo nesta seção é estudar os diferentes regimes de condução elétrica apresentados pelos mais diversos sólidos, dentre os quais se destacam os condutores, os semicondutores e os isolantes. Ao longo do texto, notaremos que os referidos regimes de condução estão relacionados com a estrutura quântica apresentada por cada material. Nessa perspectiva,

nossa análise utilizará as ferramentas próprias da mecânica quântica. É necessário que na abordagem apresentada nesta seção o ponto de partida seja a equação de Schrödinger, que é a equação básica da mecânica quântica. Um fato bastante peculiar em nossa abordagem está na discussão acerca da formação de bandas de energia em sólidos, pois enquanto grande parte dos textos dedica-se a uma análise meramente qualitativa, analisaremos também segundo a ótica quantitativa[6,7].

Antes de avançarmos e propormos o modelo de sólido a ser estudado, achamos importante desde já tecermos algumas considerações em relação ao uso de uma função (na verdade, uma distribuição) que comporá as barreiras de potenciais inerentes ao modelo: a função Delta de Dirac (δ). Um leitor mais detalhista, muito provavelmente levantará dúvidas sobre a possibilidade de existir de fato uma barreira de potencial que possa ser representada por tal distribuição, e aproveitando o ensejo, até da possibilidade de um tunelamento (transmissão de partículas com energia mais baixa que a da barreira) acontecer quando o potencial é infinito.

Primeiramente, o motivo principal que resultou nessa escolha é de ordem puramente didática: no intuito de desenvolver e apresentar um modelo o mais simples possível sobre o tema aqui abordado, do ponto de vista matemático, a função Delta de Dirac nos ocorreu como uma alternativa bastante natural, uma vez que esta distribuição pode ser manipulada em integrais de uma forma bastante descomplicada. Na verdade, essa escolha não é nenhuma novidade, não somente em certas barreiras, mas também em poços de potenciais adequados. D. Griffiths⁹ ao tratar deste assunto, realça que o uso desta função revela-se esclarecedor no que tange a aspectos básicos da teoria, tanto do ponto de vista matemático, como do físico, muito embora ele admita também que um potencial por ela representado é meramente artificial, uma vez que dificilmente um potencial assim possa ser encontrado na natureza.

Mesmo assumindo a existência de fato de uma tal barreira, é possível mostrar matematicamente que o coeficiente de transmissão através dela barreira via tunelamento é diferente de zero[9]. Formalmente,

isso se dá ao procedermos a uma reinterpretação da situação física do problema de uma partícula detentora de um estado ligado (energia negativa) que atravessa um poço de potencial infinito (infinito, porém negativo) também modelado por uma distribuição Delta de Dirac. Basta que façamos a energia da partícula ser positiva (assim eliminamos o estado ligado, como esperado) e façamos também a inversão do sinal do coeficiente multiplicativo da distribuição de Dirac, que no caso abordado logo a seguir, será representado por V_0 . Uma vez que o coeficiente de transmissão e de reflectância possuem dependência quadrática em relação ao fator multiplicativo (V_0), as soluções, *mutatis mutandis*, ainda são mantidas e portanto, a princípio, o problema apresenta solução e interpretação física adequada.

Isso posto, podemos finalmente nos concentrar na apresentação do modelofísico-matemático. No que se segue, consideraremos um sólido constituído de N átomos ocupando determinadas posiçõesfixas. Assumiremos a hipótese em que cada átomo está a uma distância a de seus vizinhos. Para simplificar a análise matemática do problema aqui estudado, e sem perda de generalidade, consideraremos um modelo de sólido linear, ou seja, um fio muito fino onde os átomos estão dispostos em fila. Nesse sentido, a energia potencial proposta é dada por

$$V(x) = \frac{\hbar^2 \lambda}{2ma} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - na),$$

onde definimos o fator multiplicativo de cada função δ como $V_0 = \frac{\lambda \hbar^2}{2ma}$, onde m é a massa do elétron, λ uma constante, \hbar sendo a constante de Planck[6,7] e a é a distância entre as barreiras de potencial.

Observando a Figura 1, percebemos que a probabilidade de se encontrar um elétron em $P_1, P_2, P_3, \dots, P_n$ deve ser a mesma, ou seja, tal probabilidade deve satisfazer a condição:

$$|\phi(x + na)|^2 = |\phi(x)|^2.$$

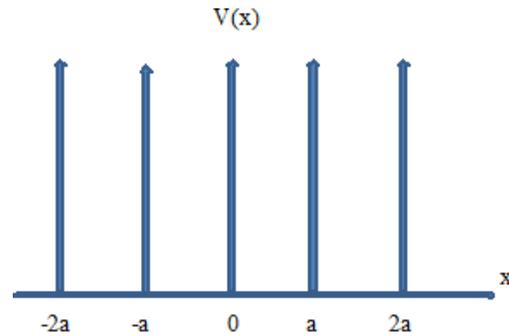


Figura 1 – Distribuição da energia potencial $V(x)$

Além disso, na região entre os dois átomos o potencial é nulo. Dessa forma, a equação de Schroedinger [6,7] para esses intervalos é dada por

$$\frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \phi(x). \quad (12)$$

No intervalo $(n - 1)a < x < na$, a solução da equação (12) é dada por

$$\phi_n(x) = A_n \sin[k(x - na)] + B_n \cos[k(x - na)].$$

E no intervalo $na < x < (n + 1)a$, a solução da equação (12) é dada por

$$\phi_{n+1}(x) = A_{n+1} \sin[k(x - (n + 1)a)] + B_{n+1} \cos[k(x - (n + 1)a)].$$

Agora devemos analisar as condições de suavidade e continuidade dessas soluções em $x = na$. A continuidade das soluções nos fornece a seguinte expressão

$$B_n = -A_{n+1} \sin(ka) + B_{n+1} \cos(ka). \quad (13)$$

A função de onda é contínua para os valores de $x = na$. Porém, sua derivada não é. Se integrarmos a equação de Schrödinger ao redor de $x = a$ (por exemplo) pode-se utilizar o fato de que a integral sobre a função delta é bem definida para chegarmos à seguinte relação[9]:

$$\lim_{x \rightarrow a^+} \frac{d\phi(x)}{dx} - \lim_{x \rightarrow a^-} \frac{d\phi(x)}{dx} = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \phi_n(a) \quad \left(\frac{\lambda}{na} \phi_n(na) \cdot e^{2i\alpha} - e^{i\alpha} [2\cos(ka) + \beta \sin(ka)] + 1 = 0 \right) \quad (18)$$

Procedendo-se aos cálculos e feitas as devidas substituições, obtemos

$$kA_{n+1} \cos(ka) + kB_{n+1} \sin(ka) - kA_n = \frac{\lambda}{a} B_n \quad (15)$$

As equações (13) e (15), após algumas manipulações, nos levam ao seguinte sistema:

$$\begin{cases} \cos(ka)A_n + [\beta \cos(ka) - \sin(ka)]B_n = A_{n+1} \\ \sin(ka)A_n + [\beta \sin(ka) - \cos(ka)]B_n = A_{n+1} \end{cases}$$

onde $\beta = \frac{\lambda}{ka}$.

A relação $|\phi(x+na)|^2 = |\phi(x)|^2$ implica que as funções $\phi(x+na)$ e $\phi(x)$ devem diferir apenas por uma fase. Nesse sentido, podemos escrever $\phi(x+na) = e^{i\alpha} \phi(x)$.

Com isso, a dependência entre os coeficientes emerge na seguinte forma:

$$A_{n+1} = A_n e^{i\alpha}, \quad (16)$$

$$B_{n+1} = B_n e^{i\alpha}. \quad (17)$$

Com esse último resultado, podemos reescrever o sistema de equações como

$$\begin{cases} [\cos(ka) - e^{i\alpha}]A_n + [\beta \cos(ka) - \sin(ka)]B_n = 0 \\ \sin(ka)A_n + [\beta \sin(ka) - \cos(ka) - e^{i\alpha}]B_n = 0 \end{cases}$$

Note que com a simplificação efetuada, o sistema de equações possui apenas duas incógnitas, representadas por A_n e B_n . Para que haja soluções diferentes das triviais (todas nulas), é necessário que a equação abaixo seja satisfeita

$$0 = \begin{vmatrix} \cos(ka) - e^{i\alpha} & \beta \cos(ka) - \sin(ka) \\ \sin(ka) & \beta \sin(ka) - \cos(ka) - e^{i\alpha} \end{vmatrix}$$

Assim, obtemos a equação característica

a qual, após algumas manipulações se apresenta como

$$\cos \alpha = \cos(ka) + \frac{\lambda \sin(ka)}{2ka}. \quad (19)$$

Observe que o lado esquerdo da equação (19) é limitado em -1 e $+1$, uma vez que se trata de uma função trigonométrica. Porém, o lado direito não possui esses limites, conforme podemos verificar na Figura 2, que para efeito apenas ilustrativo, evidenciamos sua dependência em relação aos valores assumidos por ka .

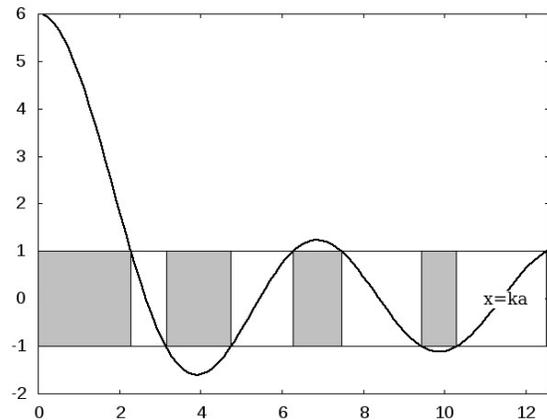


Figura 2- Gráfico da equação (19) para $\lambda = 10$.

Note também que o gráfico acima mostra claramente haver regiões onde valores assumidos por ka são proibidos, uma vez que esses valores não fornecem solução matemática para o problema (extrapolam os limites da função $\cos \alpha$). Tendo em vista que a quantidade $\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ é igual a energia E de cada estado, as regiões proibidas para ka implicam em regiões energéticas proibidas. As regiões permitidas são denominadas bandas de energia e somente essas podem ser povoadas por elétrons. Veremos a seguir como explorar o caráter de proibição ou de permissão das bandas de energia com o objetivo de caracterizar os sólidos, do ponto de vista da condução elétrica.

3.3. Caracterização dos Sólidos

De posse do resultado da seção anterior, iremos caracterizar os sólidos segundo a sua condutividade. Quando consideramos um sólido constituído por um conjunto de N átomos, conforme o modelo que apresentamos na seção anterior, supomos que as distâncias de separação atômica eram muito grandes, de forma que cada átomo pode ser considerado independente dos demais. Dessa forma, cada átomo possui o nível de energia semelhante ao que teria se estivesse isolado. Porém, à medida que os átomos se aproximam uns dos outros, os elétrons sentem a ação dos núcleos e dos elétrons dos átomos adjacentes. Dessa ação surge a necessidade de que cada estado atômico distinto venha a se desdobrar em uma série de estados eletrônicos no sólido, muito próximos uns dos outros, a fim de formar o que chamamos bandas de energia. Esta separação dos estados ocorre com a finalidade de se vir a comportar os elétrons, já que o princípio da exclusão de Pauli estabelece a impossibilidade de dois elétrons ocuparem o mesmo estado quântico. A extensão da divisão da banda depende da separação entre os átomos e se inicia nas camadas mais externas. Ainda, dentro de cada banda os estados de energia são discretos, embora a diferença entre os estados adjacentes seja demasiadamente pequena. A Figura 3 mostra a separação dos estados de cada átomo e a formação da banda de energia.



Figura 2 - Banda de Energia (fonte: cis.udel.edu)

Isolantes

Os isolantes possuem bandas completamente preenchidas seguidas de bandas completamente vazias. Isso torna difícil a condução devido à existência de zonas proibidas entre as bandas de energia. De fato, quando

temos um isolante e aplicamos sobre ele um campo elétrico na tentativa de colocar em movimento seus portadores de carga que estão nas regiões mais altas da banda preenchida, estamos, na verdade, transferindo parte da energia do campo para tais portadores, ou seja, estamos aumentando a energia cinética dos portadores de maneira a movê-los numa certa direção e provocando assim uma corrente elétrica. Entretanto, se a diferença de potencial não for muito grande, a energia fornecida ao portador de carga será apenas suficiente para ele ocupar uma zona proibida, e como isso é impossível de ocorrer, o portador não absorve a energia armazenada no campo e conseqüentemente não teremos uma corrente elétrica. Da mesma maneira, os portadores que estão em níveis de menor energia que aqueles que ocupam o topo da última banda preenchida não podem absorver a energia do campo, pois se o fizessem, passariam a ter energia igual àquela dos elétrons que ocupam níveis já preenchidos, o que é proibido pelo princípio de exclusão de Pauli. A distância entre o topo da banda preenchida e o início da primeira banda vazia num isolante é da ordem de vários elétron-volts (no diamante é $5,4\text{eV}$) e apenas campos muito intensos podem superar essa barreira. É evidente que se aumentarmos enormemente a diferença de potencial aplicada ao sólido, chegaremos a uma situação na qual a energia fornecida a ele é suficiente para dotar cada portador de carga com uma energia cinética que o coloque na banda vazia de energia. Neste caso, este portador de cargas promovido a uma banda vazia poderá se movimentar, contribuindo para o surgimento de uma pequena corrente elétrica no sistema. Mas ainda, ao deixar a banda preenchida, faz aparecer ali uma deficiência de portador (um buraco) que agora pode ser preenchido por outro elétron que ocupava níveis menos energéticos. Com isso aumenta ainda mais o trânsito de portadores no material e ele passa a conduzir. Nestes casos, dizemos que foi rompida a rigidez dielétrica do material.

Metais

Os metais são caracterizados por um preenchimento apenas parcial da última banda preenchida, como mostrado na Figura 4.



Figura 3 - Nível de Energia (fonte: cis.udel.edu)

Sendo assim, quando aplicamos um campo elétrico qualquer sobre o sólido, tais elétrons poderão absorver a energia do campo e transformá-la em energia cinética, visto haver níveis de energia muito próximos daqueles que já estão ocupando na ausência de qualquer outro campo. Portanto, ao absorverem a energia do campo elétrico externo, ganham energia cinética e passam a se movimentar em sentido contrário a esse campo, pois possuem carga negativa, de maneira a criar uma corrente. É importante notar que mesmo um campo muito pequeno irá causar uma corrente associada, pois os níveis de energia no interior de uma banda qualquer estão extremamente próximos uns dos outros, implicando numa diferença de energia muito pequena entre eles. Os elétrons que absorverem a energia do campo passam a se movimentar num potencial praticamente constante, equivalente a aquele produzido pelos núcleos atômicos e dos elétrons mais internos. Note que a quantidade de elétrons envolvidas nestas correntes é altíssima, visto que cada átomo irá contribuir com alguns elétrons de condução e existem aproximadamente 10^{23} átomos numa amostra macroscópica característica desses sistemas. É também relevante enfatizar que a resistividade dos metais aumenta com o aumento da temperatura, fato explicado do ponto de vista microscópico e já previsto no contexto da abordagem clássica.

Semicondutores

Os semicondutores constituem um caso intermediário entre os materiais isolantes e os metais. De fato, a configuração de bandas dos semicondutores é exatamente a mesma dos

isolantes, diferenciando-se apenas na largura da zona de energia proibida (o gap) entre a banda de valência e a banda de condução. Enquanto no isolante essa largura é de 5eV , para um semicondutor é inferior a 3eV (para se ter uma ideia, no Silício é de $1,1\text{eV}$). Assim, devido à proximidade das bandas de condução e de valência, o efeito da temperatura passa a ser apreciável nos semicondutores. De fato, com o aumento da temperatura, alguns portadores de carga que, em comparação com a temperatura de zero absoluto, estariam ocupando os níveis do topo da banda de valência, são promovidos à banda de condução, ficando disponíveis para promoverem a condução de eletricidade, uma que um campo elétrico externo seja aplicado. Mas ainda, estes portadores de carga (os elétrons) ao saírem da banda de valência, deixam espaços vagos (os buracos) que podem, então, ser preenchidos por outros elétrons da mesma banda, gerando também uma mobilidade de portadores. No caso dos semicondutores, a condutividade cresce com o aumento da temperatura. Vale destacar que, a densidade de portadores de carga do silício é da ordem de 10^{13} por amostra característica, sendo, portanto, muito menor do que aquelas dos metais (10^{23}). Cabe aqui acrescentar que existe uma maneira de manipular os semicondutores e assim controlar a condutividade: é o processo conhecido como dopagem. Porém, como foge ao escopo deste artigo, deixamos esse assunto para uma outra ocasião, mas sugerimos, ao leitor interessado, consultar a literatura [2].

Um semicondutor bastante utilizado nos projetos de engenharia e no desenvolvimento de hardware é o silício. O silício destaca-se por ser o segundo elemento mais abundante da crosta terrestre, com 27,5% de representatividade. Além da sua abundância, outros fatores contribuem para o silício ser o semicondutor mais utilizado nos mais variados campos, dentre os quais podemos citar: (a) o seu *gap* de energia (1,12 eV) é apropriado, pois é de fácil operacionalidade; (b) possui uma temperatura máxima de operação mais adequada que os outros materiais (150°C); (c) é termicamente oxidável, o que o torna ideal para a tecnologia planar e para a fabricação de circuitos integrados. Sendo assim, é imprescindível a um trabalhador

da área de tecnologia ter o conhecimento apurado acerca dos semicondutores e, em especial, uma conhecimento sobre o silício. No entanto, fica também para o leitor a tarefa de buscar outras fontes que tratem dos detalhes e das aplicações do silício.

Supercondutores

Conforme vimos na seção anterior, uma análise estritamente clássica não explica completamente as propriedades condutoras dos materiais. Somente quando realizamos um tratamento quântico e consideramos os efeitos do potencial da rede sobre os elétrons de condução, é que nos tornamos capazes de explicar as diferenças entre condutores, isolantes e semicondutores. Porém, quando resolvemos a equação de Schrödinger na seção anterior, omitimos as interações elétron-elétron e, portanto, seus efeitos não foram considerados. Ao acrescentar essas interações, a equação de Schrödinger a ser resolvida passa a ser escrita como⁸

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(r) + \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |r_i - r_j|} \right) \psi = E \psi, \quad (20)$$

onde $U(r)$ representa o potencial da rede, e a somatória sobre os índices i e j corresponde às interações tipo elétron-elétron. Cabe comentar também que equação (20) somente possui soluções aproximadas.

Um efeito muito interessante que resulta da interação elétron-elétron é a supercondutividade. Mais de 26 elementos da tabela periódica são supercondutores, o alumínio e o zinco são dois exemplos, e ainda há elementos que apresentam propriedades supercondutoras quando submetidos a elevadas pressões, como é o caso do silício. O fenômeno da supercondutividade foi descoberto em 1911 pelo físico holandês H. Kammerlingh Onnes, e foi quem notou que alguns materiais apresentavam a resistividade nula abaixo de uma certa temperatura característica do material, a temperatura crítica. A temperatura crítica do mercúrio é $4,2 \text{ K}$. Em meados do ano 1986, foi descoberto que certos óxidos cerâmicos se

tornam supercondutores em temperaturas relativamente elevadas. Por exemplo, a temperatura crítica do óxido de ítrio, de bário e de cobre ($YBa_2Cu_3O_7$) está em cerca de 92 K . Estas descobertas revolucionaram a supercondutividade, pois é possível resfriar esses materiais com o nitrogênio líquido, relativamente barato e fervê-lo a 77 K . A pesquisa acerca dos supercondutores está focada na busca de materiais mais resistentes que a cerâmica e que possuam uma temperatura crítica ainda mais elevada.

Um fenômeno descoberto em 1933 e que tem sido utilizado em projetos de engenharia, como por exemplo, no projeto MagLev, é o efeito Meissner. Este efeito estabelece que quando um supercondutor é resfriado abaixo de sua temperatura crítica, em um campo magnético não muito intenso, o fluxo magnético é expelido de seu interior. Devido a fenômeno, os supercondutores são considerados materiais diamagnéticos perfeitos.

Desde o seu surgimento em 1911, a supercondutividade só teve uma explicação microscópica satisfatória em 1957, pelos físicos Bardeen, Cooper e Schrieffer. A teoria proposta por esses cientistas recebe o nome de Teoria BCS e converge de forma espetacular para os resultados experimentais. Este fato rendeu aos autores da Teoria BCS da supercondutividade o prêmio Nobel de Física de 1972. Os dois ingredientes fundamentais da teoria BCS são a formação dos pares de Cooper e a existência de um hiato de energia entre o estado normal e o estado supercondutor. A teoria BCS fornece o seguinte resultado para a temperatura crítica de um supercondutor:

$$k_B T_c = 1,14 \hbar \omega e^{-\frac{1}{g(E_f) V_0}}, \quad (2)$$

onde V_0 é o potencial efetivo atrativo entre os elétrons. Como $\omega \propto M^{-\frac{1}{2}}$, sendo M a massa do isótopo, este resultado prevê a existência do efeito isotópico, com coeficiente $\alpha = 0,5$, em bom acordo com os resultados experimentais.

IV. CONCLUSÃO

Este artigo apresentou as abordagens clássica e quântica para a condução elétrica nos sólidos. No decorrer da discussão, percebemos que ambas as abordagens podem ser utilizadas de forma complementar, pois fazem previsões corretas em situações específicas. Vimos que a abordagem quântica é abrangente, pois explica de forma eficiente todos os efeitos e fenômenos pertinentes ao tema. A abordagem clássica, embora forneça a lei de Ohm coincidente com a experiência, não responde uma série de questões acerca da condução elétrica, dentre as quais os valores corretos para a condutividade elétrica de alguns materiais. Notamos ainda que, enquanto na abordagem clássica nosso ponto de partida foi a segunda lei de Newton, na abordagem quântica partimos da equação de Schrödinger. Também percebemos que os conteúdos apresentados neste artigo podem ser desenvolvidos com certa segurança pelos estudantes, já que envolve um nível matemático adequado ao currículo do curso de engenharia. É também aconselhável ao leitor realizar um aprofundamento no assunto, estudando temas como a dopagem dos semicondutores e supercondutividade, pois são temas muito úteis e de vasta aplicação em projetos de engenharia.

Consideramos também que mais alguns comentários a respeito do efeito de tunelamento se fazem necessários. Pode parecer que a justificativa utilizada para o uso de uma barreira de potencial infinita é de cunho puramente matemático, e ainda a afirmação de que uma partícula com energia finita atravesse uma barreira de potencial infinita venha ainda a se constituir um absurdo físico: na literatura em geral, encontramos situações em que uma partícula de energia finita atravessa uma barreira de potencial de energia maior, porém finita. É importante salientar que esse fenômeno (o tunelamento) é característico somente de sistemas quânticos. Na ótica de nossa intuição clássica, sempre tenderemos a considerar que *ambas* as situações são absurdas: classicamente, uma partícula *nunca* poderia atravessar uma barreira de potencial de energia superior, ou finita ou infinita! Desta forma, do ponto de vista lógico, seria indiferente aceitar uma ou outra situação: *não existe nenhuma razão suficiente para aceitarmos um absurdo em vez do outro*. Sendo assim, a questão de uma barreira de

potencial infinito poder ou não ser transponível só pode ser analisada do ponto de vista da natureza quântica da partícula e do sistema à ela vinculado.

Talvez uma abordagem mais esclarecedora possa ser posta na forma da seguinte questão: é possível saber, se no momento do tunelamento, a partícula adquiriu energia (o que é possível devido ao Princípio de Incerteza de Heisenberg) suficiente para “saltar” a barreira ou ela simplesmente a atravessou? Caso tenhamos a segunda afirmativa como resposta, o fato do potencial ser infinito ou finito não influencia em nada! Nesse sentido encontramos mais uma justificativa do porque é possível lançar mão da função Delta de Dirac. Por outro lado, se a partícula “adquiriu” momentaneamente energia suficiente para “saltar” a barreira, a princípio poderíamos pensar que essa barreira teria que ser finita para poder ser transponível.

Porém, por mais espantoso que seja, não é de fato necessariamente verdade que a barreira deva possuir um valor de potencial finito: essa exigência somente se fundamenta ao assumirmos que a partícula, para “saltá-la”, só possa vir a adquirir uma energia igualmente finita. No entanto, no momento de tunelamento, em um tempo muito curto (por isso a barreira tem de ter largura pequena), a partícula deixa de ter natureza real e passa ser considerada uma partícula virtual [10] - estado também conhecido como “*off mass-shell*”. Isso significa dizer que ela pode assumir *qualquer valor de energia*, inclusive *infinita*! E neste caso, mesmo sendo a barreira de potencial infinita, ela poderia ainda ser transponível. Estados virtuais das partículas são lugares-comuns em física de partículas – eles aparecem nos conhecidos diagramas de Feynman [11], como estados intermediários, e uma vez que estes podem possuir quantidades infinitas a eles relacionadas, necessitam de um tratamento mais complexo, os quais são os conhecidos métodos de renormalização em Teoria Quântica de Campos. Nessa abordagem, não ser real (ou ser virtual) implica que a partícula não pode ser medida exatamente quando está ocorrendo a interação. Ao tentarmos determinar a energia de uma partícula tunelando, bombardeando-a por exemplo com outras partículas, simplesmente destruímos o fenômeno

de tunelamento. Essa descrição é bastante análoga ao que acontece no famoso experimento de fenda dupla em regime quântico, quando encontramos uma configuração de auto-interferência de um único fóton: ao tentarmos localizar por qual fenda o fóton passou, o fenômeno ondulatório desaparece!

Talvez em um tunelamento, infelizmente, nunca possamos realmente vir a saber se a partícula “saltou” ou simplesmente “atravessou” a barreira de potencial, da mesma forma que também é impossível saber por qual fenda o fóton passou, como no caso da experiência da fenda dupla. De toda forma, o fenômeno é um fato experimental, pois partículas reais são perfeitamente medidas antes e depois do fenômeno, confirmando que houve transmissão diferente de zero.

Assim, estamos convencidos de que essa discussão é esclarecedora e mostra que um potencial infinito não vem a se configurar um absurdo à luz da interpretação da mecânica quântica, ao ser integrado no modelo.

REFERÊNCIAS

1. Padilha, A. F. (2008). Materiais de Engenharia, Propriedades e Microestrutura. Hemus.
2. Swart, J. W. (2008). Semicondutores. Campinas: Editora Unicamp.
3. Callister, W. D. (2005). Materials science and engineering introduction. 7ª Edição. John Wiley and Sons, Inc.
4. Chiaverini, V. (2000). Tecnologia Mecânica: Volume I.2 edição. Pearson Education do Brasil.
5. Van Vlack, L.H (2005). Princípios de Ciência e Tecnologia dos Materiais. Edgar Blucher.
6. Landau, L.D., Lifshitz, E.M. (1977). Quantum Mechanics. Oxford: Pergamon Press.
7. MESSIAH, A (1961). Quantum Mechanics. New York: Wiley.
8. Ostermann, F., Ferreira, L. M., Cavalcanti, J. H. (1998) Tópicos de Física Contemporânea no Ensino Médio: um Texto para Professores sobre Supercondutividade. Revista Brasileira de Ensino de Física 20: 270.

9. Veja, por exemplo, Griffiths, J.D.(2005).Introduction to Quantum Mechanics. New Jersey: 2ª Edição. Person Education, Inc.

10. Veltman, M. (2003). Facts and Mysteries in Elementary Particle Physics. Singapore:1ª Edição. World Scientific.

11. Griffiths, J.D.(1987). Introduction to Elementary Particles . New York: John Wiley & Sons, Inc.