

INTRODUÇÃO A TEORIA DE BANDAS EM SÓLIDOS

C. M. da Silva

Departamento de Física - UFSM, Santa Maria, RS

RESUMO

As bandas de energia em metais são apresentadas de forma qualitativa. Estas são consequência do efeito do potencial periódico dos ions da rede sobre os níveis de energia de eletrons livres.

SUMMARY

DA SILVA, C. M. 1990. A QUALITATIVE VIEW OF BANDS IN SOLIDS. Ciência e Natura, 14: 47-51, 1992.

The band theory of metals is presented in a qualitative way. The bands are a consequence of the lattice periodic potential on free electrons energy levels.

O objetivo deste texto é mostrar de forma qualitativa que nos sólidos os elétrons ocupam bandas de energia. Há regiões de energia permitida e regiões de energia proibida. Uma explicação mais completa sobre o assunto aqui tratado pode ser encontrada nas referências citadas no fim do texto.

Os sólidos podem ser divididos em duas grandes classes: cristalinos e amorfos. No grupo dos cristalinos, que são a maioria, os átomos encontram-se aranjados de forma regular. Neste grupo estão os metais e muitos minerais. Os sólidos cristalinos podem estar aranjados em sete sistemas formando 14 redes possíveis conhecidas como redes de Bravais. Os sólidos amorfos não tem ordem de longo alcance, o que ocorre nos cristalinos, a configuração local muda de átomo para átomo. Um exemplo de sólido amorfo é o vidro.

Para determinação do comportamento energético dos elétrons em um sistema qualquer é necessário resolver a equação de Schrödinger, a qual, na forma independente do tempo, é dada por:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right] \psi(r) = E \psi(r), \quad (1)$$

onde as características do sistema estão expressas no potencial $V(r)$.

A equação de Schrödinger tem solução para um elétron interagindo com o núcleo atômico. Em um sólido temos a interação de um elétron com todos os núcleos e com todos os outros elétrons que compõem o sólido. Temos assim um problema de muitos corpos. Devido a isso para a descrição do comportamento dos elétrons em um

sólido são necessárias aproximações. A aproximação mais simples é supor um sólido infinito com elétrons livres e não interagentes. A equação de Schrödinger em uma dimensão, para este caso simples é:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_n(r) = \epsilon_n \psi_n(r), \quad (2)$$

onde ϵ_n é a energia do elétron no orbital n . Relembramos que a solução da equação (2) é para um elétron, assim em um sistema de N elétrons cada um ocupa um estado que é solução para um sistema com apenas um elétron.

A condição de sólido infinito impõe como condição de contorno $\psi_n(0) = \psi_n(L)$, e a solução da equação (2) é dada por uma onda progressiva

$$\psi_n(x) = A e^{ik_n x} \quad (3)$$

onde $k_n = \frac{2\pi}{\lambda}$, a condição de contorno implica em $k_n = \frac{n\pi}{L}$. Substituindo-se (3) em (2) obtemos as energias ϵ_n ,

$$\epsilon_n = \frac{\hbar^2}{2m} k^2, \quad \text{ou} \quad \epsilon_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{n\pi}{L} \right]^2. \quad (4)$$

A energia ϵ_n em função de k é representada na fig. 1.

O modelo de elétrons livres não interagente dá uma boa explicação para as propriedades térmicas e elétricas dos sólidos, mas não é capaz de responder porque há materiais bons condutores e porque há materiais maus condutores.

Para entender porque há materiais condutores e materiais isolantes, deve-se considerar o efeito da rede sobre os níveis energéticos dos elétrons. Isso pode ser feito resolvendo-se a equação de Schrödinger para um potencial periódico. Aqui, no entanto, será feito um tratamento qualitativo, onde supõem-se que o comportamento dos elétrons é perturbado pelo potencial periódico causado pelos ions da rede cristalina.

Como já vimos, as funções de onda no modelo de elétrons livres não interagentes são ondas progressivas, as quais ao se propagarem em um cristal sofrem difração, conhecida como reflexão de Bragg.

A condição de Bragg para difração de uma onda é:

$$2 d \sin\theta = n \lambda. \quad (5)$$

Em um cristal linear com parâmetro de rede a ($d=a$ na eq. (5)) há difração para $\theta = 90$ graus, implicando em comprimentos de onda (λ) iguais a $2a/n$, ou em termos do número de ondas (k) iguais a $n\pi/a$. A primeira reflexão ocorre para $k=\pi/a$. Portanto na região de $k = \pm \pi/a$ a função de onda não será uma onda progressiva do tipo $e^{i\pi x/a}$ e $e^{-i\pi x/a}$ do modelo de elétrons livres. A solução para esse particular valor de k é constituída de ondas que se propagam para a direita e para a esquerda. Devido as sucessivas reflexões de Bragg, originar-se-ão ondas estacionárias. Assim há regiões em energia em que a solução da equação de Schrödinger, como onda progressiva, não existe.

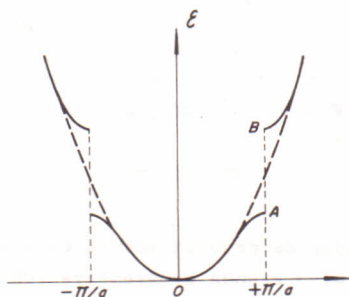


Fig. 1 - A linha pontilhada é a solução para elétrons livres. A linha contínua é a solução para elétrons quase livres (potencial perturbado pelo potencial da rede).

Podemos formar duas ondas estacionárias a partir de ondas progressivas que se deslocam para a direita e para a esquerda:

$$\psi(+)=e^{i\pi x/a}+e^{-i\pi x/a}=2\cos(\pi x/a);$$

$$\psi(-)=e^{i\pi x/a}-e^{-i\pi x/a}=2i\sin(\pi x/a). \quad (6)$$

As ondas estacionárias tem sinal + ou - se função par ou impar.

As funções de onda $\psi(+)$ e $\psi(-)$ aumentam a densidade eletrônica em regiões diferentes do cristal, portanto, elétrons com energias diferentes. Para ondas progressivas tipo $e^{i\pi x/a}$ a densidade de probabilidade é constante, pois:

$$\rho=|\psi|^2 \quad \rho=e^{i\pi x/a}e^{-i\pi x/a}=1, \quad (7)$$

Para as ondas estacionárias não ocorre o mesmo. Temos:

$$\rho(+) = |\psi(+)|^2 \propto \cos^2(\pi x/a),$$

$$\rho(-) = |\psi(-)|^2 \propto \sin^2(\pi x/a). \quad (8)$$

A distribuição da densidade de carga é mostrada na fig. 2. A função de onda $\psi(+)$ concentra cargas negativas nas regiões de menor potencial, sobre os íons positivos, enquanto que a função de onda $\psi(-)$ concentram cargas entre os íons, regiões de potencial maior.

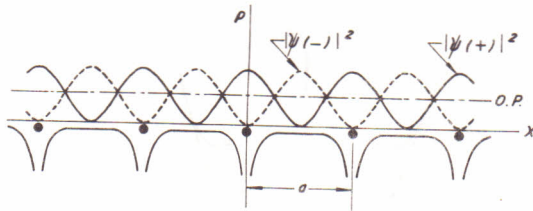


Fig. 2 - Densidades de probabilidades para as funções de onda $\psi(+)$ e $\psi(-)$ e onda progressiva (OP). A linha contínua na parte negativa de ρ é o potencial produzido pelos íons da rede.

Calculando-se a energia média das três distribuições possíveis de cargas, encontra-se que a energia potencial de $\rho(+)$ é menor que a das ondas progressivas, enquanto que a de $\rho(-)$ é maior. Esse efeito é mostrado na fig. 1 pela linha contínua. Se as energias de $\rho(+)$ e de $\rho(-)$ diferirem de E_g , tem-se assim um gap (separação) de energia de magnitude E_g . A função de onda abaixo do gap (ponto A) é $\psi(+)$, e a função de onda logo acima do gap (ponto B) é $\psi(-)$.

Com essa distribuição de energia podemos entender porque há materiais condutores e há materiais isolantes. Quando os elétrons ocupam uma banda de energia parcialmente, há níveis de energia muito próximos, uma pequena energia fornecida pelo campo elétrico é suficiente para que esses elétrons adquiram energia cinética, e assim conduzem corrente elétrica. Por outro lado se não houverem níveis disponíveis (banda cheia), a energia fornecida pelo campo não é suficiente para que os elétrons atinjam o nível de energia superior, situado na banda acima, sendo assim um isolante. Estes efeitos estão representados esquematicamente na fig. 3. Na fig. 3 está também representada a estrutura de bandas de um semiconductor.

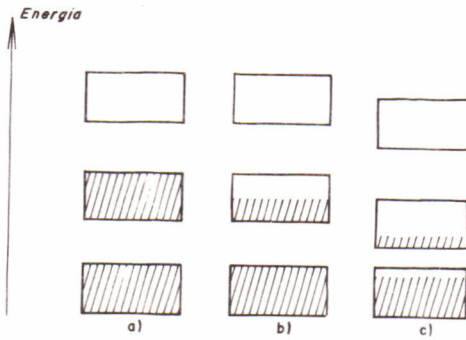


Fig. 3 - a) Isolante; b) condutor; c) semi-condutor.

Referências:

1. P. A. Tipler, Física Moderna, Ed. Guanabara Dois, RJ, 1981.
2. R. Eisberg e R. Resnick, Física Quântica, Ed. Campus, RJ, 1979.
3. C. Kittel, Introduction to Solid States Physics, John Wiley & Sons, N. York, 1976.
4. N. W. Ashcroft e N. D. Mermin, Solid State Theory, Saunders College, Philadelphia, 1976.
5. O. Madelung, Introduction to Solid State Theory, Springer-Verlag, Berlin, 1978.

