



CÁLCULO DA MASSA EFETIVA DO ELÉTRON EM UM SEMICONDUTOR

Área temática: Gestão do Produto

Agamenon Vale

agamenon.lv@gmail.com

Clóves Rodrigues

cloves@pucgoias.edu.br

Resumo: *O objetivo deste trabalho é formular uma equação que calcule a massa efetiva do elétron, em um cristal semicondutor, utilizando como parâmetros a temperatura do semicondutor, a frequência dos fonôns, a constante eletrostática estática e a constante eletrostática de alta frequência. Para isso, faz-se necessário conhecer o que são materiais e compreender as ligações químicas entre os diversos tipos de materiais. Feito isso, um pequeno estudo sobre semicondutores é feito, terminando por comparar os resultados obtidos com alguns resultados da literatura.*

Palavras-chaves: *Semicondutor, Massa efetiva, Materiais.*



1. Introdução

Para uma melhora da condição de vida do ser humano é necessário compreender como transformar os recursos naturais em produtos cada vez mais eficientes, criando novas possibilidades de aplicações. Dessa forma, os materiais passaram a ser classificados, conforme as suas principais características, o que possibilitou observar características comuns e interessantes para as mais diversas aplicações e indústrias.

Entre os diversos grupos de materiais com propriedades elétricas interessantes, os **semicondutores** foram observados, inicialmente, por Alessandro Volta (1745 -- 1827), sendo estudados intensamente no início do século XX, alavancando intensamente a indústria eletrônica e promovendo uma grande revolução da computação e da eletrônica. Dentre os dispositivos criados com materiais semicondutores podemos citar: diodos, *light emitting diode* (led), transistores, detectores diversos etc.

Para entendermos o que é um semicondutor, definimos, na seção 2, o que vem a ser materiais, quais suas características e tipos. Na seção 3 procuramos esclarecer a importância de conhecer as ligações químicas. Os semicondutores, propriamente ditos, são estudados na seção 4. Nesta seção, é feito um estudo sistemático sobre as características do cristal semicondutor. A contribuição acadêmica deste trabalho está na seção 5 onde propomos uma forma alternativa de se calcular a massa efetiva e comparamos os resultados obtidos com os resultados já conhecidos na literatura.

2. Materiais Semicondutores

Em todas as atividades humanas há a dependência de materiais. Esses materiais são utilizados nos meios de transporte, nas residências, no vestuário, nos meios de comunicação, no processamento de dados, no comércio, no lazer, na produção de alimentos, nos itens de saúde e de ensino, na geração e transporte de energia e em muitas outras áreas, atividades e segmentos. Dessa forma, o conhecimento e a habilidade em produzir e manipular materiais afetam diretamente o nível de vida da população. Historicamente, pode-se afirmar que nível de desenvolvimento de um povo está diretamente relacionado à sua habilidade em produzir e manipular os materiais, sendo que as culturas passadas foram classificadas de acordo com essa habilidade, como, por exemplo, a idade da pedra, a idade do bronze e a idade do ferro.



Componentes eletrônicos estão presentes na maioria das atividades humanas. Para grande maioria das pessoas é difícil imaginar alguma atividade humana que não dependa, direta ou indiretamente, de algum sistema eletrônico. Entende-se a dependência indireta como sendo a produção de utensílios utilizados nas atividades humanas, a análise de seus resultados, o transporte de bens e a comercialização de bens. No entanto, todos os dispositivos eletrônicos são baseados em materiais, sendo o semicondutor silício o mais importante. Outros materiais utilizados nas engenharias eletrônica e elétrica são igualmente importantes e imprescindíveis, recebendo atenção no estudo de materiais elétricos.

Materiais são substâncias cujas propriedades as tomam utilizáveis em estruturas, máquinas, dispositivos ou produtos consumíveis [VanVlack, 1984]. Portanto, há a necessidade de conhecer as propriedades dos materiais. Um exemplo de materiais com propriedades distintas: metais, cerâmicas, semicondutores, supercondutores, polímeros ou plásticos, vidros, fibras, madeira, areia, pedra e vários conjugados.

A qualidade e as características dos materiais empregados na manufatura de produtos influenciam na qualidade do produto final. Além disso, a forma como esses materiais reagem ao meio ambiente ao qual estarão expostos também determinam a qualidade do produto final.

De forma geral, especialistas em engenharia e ciência de materiais tratam da geração e aplicação do conhecimento que relaciona composição, estrutura e processamento de materiais com suas propriedades e seus usos. Essa ciência e essa engenharia englobam os seguintes aspectos dos materiais:

- a) a ciência e o entendimento básico dos materiais;
- b) a relação entre a estrutura, as propriedades e o desempenho de um material com seu processamento durante a confecção ou durante seu uso;
- c) as necessidades e as experiências sociais do uso dos materiais na confecção de produtos.

Há um princípio básico de materiais que diz: “As propriedades de um material originam-se na sua estrutura interna”. No entanto, a estrutura do material apresenta uma dependência estreita com a forma de seu processamento. Assim, há também uma relação das propriedades do material com as condições de seu processamento. A estrutura interna dos



materiais envolve não apenas o tipo de átomo de sua constituição, mas também como eles se associam entre si, formando cristais, moléculas ou microestruturas.

Qualquer ação que cause uma modificação da estrutura interna do material afetará suas propriedades. Essas ações podem ocorrer durante o processamento, como parte deste, ou durante o uso do produto, por esforços e/ou condições ambientais.

Entre os vários materiais que existem, a propriedade física que apresenta a maior variação é a resistividade elétrica, justamente a propriedade de maior interesse do engenheiro elétrico e eletrônico. Esta propriedade pode variar de $10^{18} \Omega\text{m}$ (quartzo, poliestireno) a $10^{-8} \Omega\text{m}$ (prata, cobre), ou várias ordens de grandeza maiores que isso, no caso de supercondutores. Valores típicos são apresentados na Tabela 1; valores exatos dependem da temperatura, da estrutura interna e do processo de fabricação.

Tabela 1 - Condutividade elétrica à temperatura ambiente.

Material	Substância	Resistividade (Ωm)
Condutores	Prata	$1,59 \times 10^{-8}$
	Cobre	$1,68 \times 10^{-8}$
	Ouro	$2,21 \times 10^{-8}$
	Alumínio	$2,65 \times 10^{-8}$
	Ferro	$9,62 \times 10^{-8}$
	Mercúrio	$9,62 \times 10^{-7}$
	Nicromo	$1,00 \times 10^{-6}$
	Manganês	$1,44 \times 10^{-6}$
	Grafite	$1,40 \times 10^{-5}$
Semicondutores	Água salgada (saturada)	$4,41 \times 10^{-2}$
	Germânio	$4,61 \times 10^{-1}$
	Silício	$2,50 \times 10^3$
Isolantes	Água (pura)	$2,50 \times 10^5$
	Madeira	$10^8 - 10^{11}$
	Vidro	$10^{10} - 10^{14}$
	Quartzo (fundido)	$\sim 10^{16}$

Do ponto de vista da propriedade da resistividade elétrica os materiais podem ser agrupados em:

- isolantes ou dielétricos: são os materiais que praticamente não apresentam elétrons livres em sua estrutura cristalina, ou seja, todos os elétrons estão



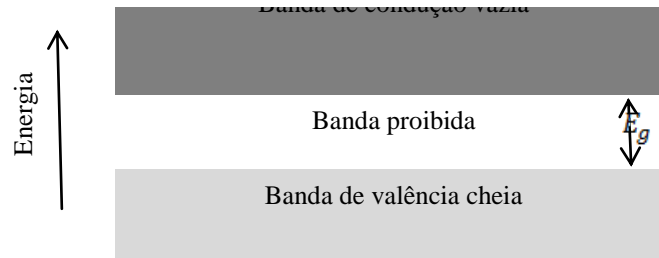
fortemente ligados aos seus átomos ou as suas moléculas, não tendo liberdade de sair desta estrutura quando um campo elétrico externo é aplicado ao material;

- b) semicondutores: os materiais que têm suas características elétricas situadas entre as características dos dielétricos e as características dos condutores. Os semicondutores possuem resistividade elétrica no intervalo entre 10^{-4} a 10^7 Ωm , que são valores intermediários entre os bons condutores (10^{-8} Ωm) e bons isolantes (entre 10^{12} e 10^{20} Ωm);
- c) condutores: materiais que apresentam uma grande quantidade de elétrons livres. Quando um campo elétrico externo é aplicado ao material, surge uma corrente elétrica que é o fluxo de elétrons, ou de portadores de carga, conforme o caso, em função do tempo que atravessa certa área de referência no material;
- d) supercondutores: materiais que apresentam quase nenhuma resistência ao movimentos dos elétrons. O fenômeno da supercondutividade ocorre quando certos materiais são resfriados a temperaturas muito baixas. Há um grande esforço para encontrar materiais que apresentam essa propriedade a temperaturas ambientais.

Um semicondutor puro perfeito torna-se isolante no zero absoluto (0 K), pois todos os elétrons estão na banda de valência e estão ligados aos átomos e moléculas que constituem o cristal semicondutor. Logo, não há condutividade e a resistividade é máxima. A Figura 1 mostra que existe uma lacuna de energia E_g , que é a diferença de energia entre o ponto superior da banda de valência e o ponto inferior da banda de condução. As propriedades de um semicondutor dependem das impurezas, das excitações térmicas, dos defeitos da rede ou dos desvios de suas composições químicas. A medida que a temperatura do cristal aumenta, os elétrons que estão nos estados da banda de valência de maior energia adquirem energia suficiente para saltar a lacuna de energia E_g e ocupar os estados menos energéticos da banda de condução, deixando espaços vazios na banda de valência. Esses espaços são denominados de buracos.



Figura 1 - Esquema de banda para a condutividade intrínseca num semiconductor. A 0 K a condutividade é zero, porque todos os estados da banca de valência estão cheios e todos os estados da banca de condução estão vazios. À medida que a temperatura cresce, os elétrons ficam termicamente excitados, pulando da banca de valência para a banca de condução, na qual eles se tornam móveis.

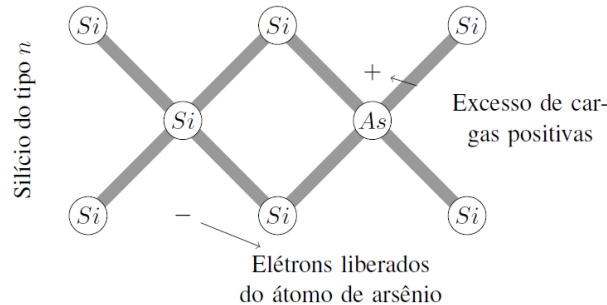


Além da energia térmica, podemos controlar a densidade de portadores de carga mediante a adição de impurezas na rede cristalina. Essas impurezas são átomos com valência maior ou menor do que o átomo que forma a rede cristalina do cristal semiconductor. Como exemplos, a adição de boro (*B*) ao silício (*Si*), na proporção de um átomo de boro para 10^5 átomos de silício, provoca um aumento de um fator de 10^3 na condutividade do silício puro para a temperatura ambiente. O processo de adição de impureza é denominado dopagem.

Para compreendermos o efeito da dopagem nos cristais semicondutores, consideraremos o silício e o germânio (*Ge*) que se cristalizam com a estrutura do diamante, ou seja, cada átomo forma quatro ligações covalentes com seus vizinhos mais próximos, que corresponde a valência química quatro. Se colocarmos um átomo de valência química igual a cinco como, por exemplo, o fósforo (*P*), o arsênio (*As*) ou o antimônio (*Sb*), no lugar de um átomo de silício ou germânio, existirá um elétron de valência libertado após as quatro ligações covalentes serem feitas, como indicado na Figura 2.



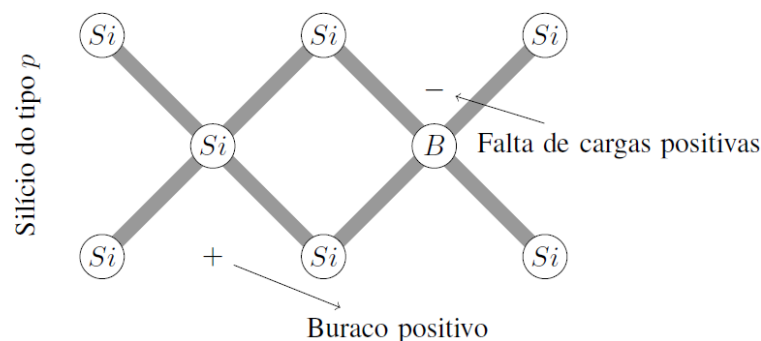
Figura 2 - Cargas associadas com um átomo de impureza de arsênio no silício. O silício tem quatro elétrons na camada de valência e o arsênio tem cinco. Assim, os quatro elétrons do arsênio formam ligações covalentes tetraédricas e o quinto elétron torna-se disponível para condução.



Observando a Figura 2 percebemos que o cristal semiconductor dopado com um átomo doador de elétrons passa a ficar com excesso de elétrons, esses elétrons são elétrons livres, melhorando a condutividade do cristal semiconductor. Esse cristal é denominado *tipo n*. Notemos que, eletricamente falando, o cristal continua neutro pois ele conta com a mesma quantidade de elétrons e de prótons.

Como um elétron pode estar ligado a uma impureza pentavalente, um buraco também pode. Para isso, basta colocar um átomo trivalente como, por exemplo, o boro (*B*), o alumínio (*Al*), o gálio (*Ga*) ou o índio (*In*), no lugar do átomo de germânio ou de silício. Essas impurezas são denominadas de impurezas aceitadoras ou receptora porque elas podem receber um elétron da camada de valência, deixando um buraco nessa banda. Veja a Figura 3.

Figura 3 - Cargas associadas com um átomo de impureza de boro no silício. O silício tem quatro elétrons na camada de valência e o boro tem três. Assim, para realizar as ligações covalente tetraédricas o átomo de boro deve receber um elétron da ligação $Si - Si$, deixando um buraco na camada de valência.





O cristal semiconductor dopado com átomos receptores é denominado *tipo p* por conter buracos com carga positiva na camada de valência.

5. Massa Efetiva do Elétron

A equação (1) mostra a estrutura da constante α , onde e é a carga elementar do elétron, ω é a frequência dos fônons, γ é uma constante, k é a constante de Boltzmann, T é a temperatura e $k_0(z)$ e $k_1(z)$ são funções modificadas de segunda ordem de Bessel.

$$\alpha = \frac{e^2 \omega^2 \gamma}{3} \sqrt{\frac{2m_e^*{}^3}{\pi(kT)^3}} e^z \{ [v - (1+v)e^{-2z}] k_0(z) - [v + (1+v)e^{-2z}] k_1(z) \} \quad (1)$$

As constantes γ , z e v são dadas pelas equações (2), (3) e (4), respectivamente.

$$\gamma = \frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \quad (2)$$

$$z = \frac{\hbar\omega}{2kT} \quad (3)$$

$$v = \frac{1}{e^{2z} - 1} \quad (4)$$

Na equação (2) ϵ_0 é a constante eletrostática estática e ϵ_∞ é a constante eletrostática de alta frequência. Na equação (3) ω é a frequência dos fônons, k é a constante de Boltzmann cujo valor é $1,3806488 \times 10^{-16}$ erg/K, T é a temperatura do cristal semiconductor e $\hbar = 1,0545717 \times 10^{-17}$ erg·s é a constante de Dirac.

Substituindo a equação (4) na equação (1) acabamos por reduzir a equação (1) para a equação (5).



$$\alpha = \frac{e^2 \omega^2 \gamma}{3} \sqrt{\frac{2m_e^{*3}}{\pi(kT)^3}} e^z \frac{2}{e^{2z} - 1} k_1(z) \quad (5)$$

A equação (6) foi obtida a partir da equação (5). Notemos que a massa efetiva do elétron depende diretamente da temperatura do cristal semiconductor.

$$m_e^* = kT \left[\frac{\pi}{2} \left(\frac{3\alpha(e^{2z} - 1)}{e^2 \omega^2 \gamma e^z 2k_1(z)} \right)^2 \right]^{1/3} \quad (6)$$

Utilizando a equação (6) podemos determinar a massa efetiva do elétron m_e^* para qualquer cristal semiconductor a temperatura ambiente ($T = 300$ K), considerando um campo elétrico de baixa intensidade.

Tabela 2 – Parâmetros usados

Semicondutor	ϵ_0	ϵ_∞	ω
GaAs	12,91	10,91	$5,618 \times 10^{+13}$
GaN	9,50	5,35	$1,397726 \times 10^{+14}$
ZnSe	7,60	5,40	$4,785693 \times 10^{+13}$
ZnS ZB	8,32	5,15	$6,532850 \times 10^{+13}$

Tabela 3 - Resultados

Semicondutor	m_{exp}^*	m^*	Razão entre as massas	Erro(%)
GaAs	$6,030385 \times 10^{-29}$	$6,103286 \times 10^{-29}$	0,0662	1,194462
GaN	$1,834475 \times 10^{-28}$	$2,004064 \times 10^{-28}$	0,201383	8,462264
ZnSe	$1,489203 \times 10^{-28}$	$1,366407 \times 10^{-28}$	0,163480	8,245707
ZnS ZB	$2,860423 \times 10^{-28}$	$3,097190 \times 10^{-28}$	0,314008	7,644588



Observando a Tabela 2, notamos que o erro experimental é pequeno, menor do que 10%, o que mostra a eficiência da equação (6).

6. Conclusões

Neste trabalho foi calculada a massa efetiva do elétron em um cristal semicondutor. Inicialmente, foi discutida a importância dos materiais semicondutores e algumas de suas características. Foi deduzida uma equação para determinar a massa efetiva do elétron em um cristal semicondutor para campos elétricos aplicados de baixa intensidade. Verificou-se que para os semicondutores *GaN*, *ZnSe* e *ZnS (ZB)* uma diferença percentual entre a massa efetiva calculada aqui e a massa experimental da ordem de 10%. Observamos que a equação (6) pode também ser aplicada a outros semicondutores.

Referências

Rodrigues, C. G., Vasconcellos, A. R., Luzzi, R. *A Kinetic Theory for Nonlinear Quantum Transport*. Transport Theory and Statistical Physics, v.29, pp. 733- 757, 2000.

Van Vlack, L. H. (1984). *Princípios de ciência e tecnologia dos materiais*. Elsevier, Rio de Janeiro, 4 edition. ISBN 978-85-700-1480-1.