# Análise das Propriedades de Transporte Eletrónico em Sólidos: Determinação do Coeficiente de Temperatura e da Energia de banda proibida

Protocolo de Laboratório

Laboratório de Física III

Departamento de Física e Astronomia da Faculdade de Ciências da Universidade do Porto (DFA@FCUP)

## Conteúdo

1	Introdução	<b>2</b>
	1.1 Metais, Semicondutores e Isoladores	2
	1.2 Condução nos metais	3
	1.3 Condução nos semicondutores	5
2	Preparação e Montagem	8
3	Procedimento Experimental	10
4	Análise de Dados e Questões de Discussão	10
5	Relevância e Implicações Tecnológicas	12
	5.1 Implicações Tecnológicas em Metais	12
	5.2 Implicações Tecnológicas em Semicondutores	12
6	Anexo	14

### **Objetivos**

O presente protocolo de trabalho visa aprofundar os conceitos de condução elétrica em diferentes materiais, com os seguintes objetivos:

- Estudar a dependência da resistência elétrica de um condutor metálico com a temperatura.
- Determinar o coeficiente de temperatura da resistência,  $\alpha$ , para um condutor metálico.
- Analisar a variação da corrente de fuga em polarização inversa de um díodo de silício com a temperatura.
- Determinar a largura da banda proibida (banda proibida,  $E_g$ ) de um semicondutor a partir da análise da sua corrente de fuga.
- Familiarizar-se com técnicas de medição em corrente alternada (LCR meter) e com o controlo de variáveis em processos térmicos.

## 1 Introdução

## 1.1 Metais, Semicondutores e Isoladores

A condutividade elétrica  $(\sigma)$  ou o seu inverso denominada de resistividade  $(\rho)$  de um material depende da sua capacidade de ter portadores de carga (eletrões ou lacunas) que se podem mover livremente e é uma caracteristica intrinseca/especifica dos materiais. A Teoria de Bandas explica esta diferença com base na estrutura de energia dos eletrões no interior de um sólido. A dimensão do banda proibida  $(E_g)$  é a diferença crucial que define se um material é um condutor, um semicondutor ou um isolador (ver Figura 1) [1] [2].

## A) Condutor

## B) Semicondutor

C) Isolador

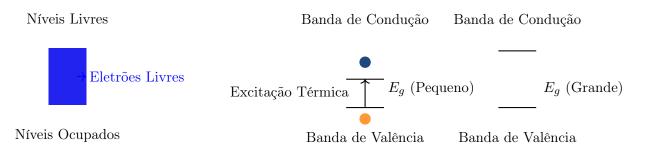


Figura 1: Diagrama de bandas de energia que ilustra a diferença entre os três tipos de materiais. A diferença na condutividade é determinada pela dimensão do banda proibida  $(E_q)$ .

## 1.2 Condução nos metais

Nos metais o banda proibida  $E_g$  é extremamente reduzido, podendo ser considerado nulo. Neste caso, os eletrões de valência atuam como eletrões de condução, sempre disponíveis mesmo à temperatura  $T \sim 0$  K. A densidade de eletrões de condução é muito elevada  $(n \sim 10^{23} \ {\rm cm}^{-3})$ , justificando a alta condutividade elétrica. A resistividade  $\rho$  de um metal resulta essencialmente do espalhamento destes eletrões por fonões (quanta das vibrações da rede cristalina), por impurezas, defeitos ou por interações mais complexas (momentos magnéticos, efeitos quânticos).

Modelo de Drude. No modelo clássico de Drude [3], os eletrões comportam-se como um gás de partículas carregadas com densidade n (número de eletrões livres por unidade de volume), carga e (carga elementar), massa m (massa do eletrão livre) e tempo médio entre colisões  $\tau$ . A condutividade  $\sigma$  e a resistividade  $\rho$  são:

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m}, \qquad \rho = \frac{m}{ne^2\tau}.$$
 (1)

Modelo de Sommerfeld (gás de fermiões). Sommerfeld melhorou o modelo aplicando a Mecânica Quântica e a estatística de Fermi-Dirac. A energia mais alta ocupada a 0 K é a energia de Fermi,  $E_F$  (tipicamente 5–10 eV nos metais). A distribuição de ocupação é

$$f(E) = \frac{1}{e^{(E-E_F)/k_BT} + 1},\tag{2}$$

onde  $k_B$  é a constante de Boltzmann (1.38 × 10<sup>-23</sup> J/K) e T a temperatura absoluta. Apenas estados próximos de  $E_F$  (numa vizinhança  $\sim k_B T$ ) contribuem para o transporte.

Neste modelo, pode também introduzir-se a **massa efetiva**  $m^*$ , que substitui a massa livre m para contabilizar interações com o potencial periódico da rede cristalina.

Interação electrão-fonão: Lei de Bloch-Grüneisen. A resistividade devida a fonões é descrita por [5, 6]:

$$\rho_{\text{fonões}}(T) = C \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^5 \int_0^{\Theta_D/T} \frac{x^5}{(e^x - 1)(1 - e^{-x})} dx,\tag{3}$$

onde  $\Theta_D$  é a temperatura de Debye (temperatura característica de um sólido que marca o limite acima do qual todas as vibrações da rede cristalina estão excitadas- comportamento clássico, e abaixo do qual predominam efeitos quânticos na capacidade calorífica) e C uma constante que depende do material. Assim, para  $T \ll \Theta_D$ ,  $\rho_{\text{fonões}} \propto T^5$ ; para  $T \gg \Theta_D$ ,  $\rho_{\text{fonões}} \propto \alpha_\rho T$ ,  $\alpha_\rho$  é o coeficiente associado à variação intrínseca da resistividade com T (espalhamento electrão-fonão. A resistividade total é

$$\rho(T) = \rho_0 + \rho_{\text{fonões}}(T), \tag{4}$$

com  $\rho_0$  a resistividade residual (devida a impurezas e defeitos).

Resistência Elétrica. A resistência elétrica R é medida experimentalmente em função da temperatura T e depende da resistividade  $\rho(T)$ , do comprimento L do condutor e da área da sua secção transversal A:

$$R(T) = \rho(T) \frac{L(T)}{A(T)}. (5)$$

Dilatação térmica e coeficientes  $\alpha$ . As dimensões do condutor variam com a temperatura devido à dilatação linear, caracterizada pelo coeficiente  $\alpha_L$ :

$$L(T) = L_0[1 + \alpha_L(T - T_0)], \qquad A(T) = A_0[1 + 2\alpha_L(T - T_0)], \qquad (6)$$

daqui resulta

$$\frac{L(T)}{A(T)} \approx \frac{L_0}{A_0} [1 - \alpha_L(T - T_0)].$$
 (7)

Logo, a resistência escreve-se (considerando T»  $\theta_D$ )

$$R(T) \approx R_0 [1 + (\alpha_\rho - \alpha_L) (T - T_0)], \qquad (8)$$

onde  $R_0$  é a resistência a  $T = T_0$ ,  $\alpha_{\rho}$  é o coeficiente associado à variação intrínseca da resistividade com T (espalhamento electrão-fonão), e  $\alpha$  o coeficiente térmico global da resistência:

$$\alpha \equiv \frac{1}{R} \frac{dR}{dT} \approx \alpha_{\rho} - \alpha_{L}, \qquad \alpha_{\rho} = \alpha + \alpha_{L}.$$
 (9)

Como regra de ordem de grandeza,  $\alpha_{\rho} \sim 10^{-3}\,$  e  $\alpha_{L} \sim 10^{-5}\,$ , pelo que a dilatação corrige  $\alpha$  em apenas  $\sim 1-2\%$ , não sendo relevante. Conclui-se que a dependência de  $\rho(T)$  com a temperatura provém essencialmente da interação electrão—fonão.

Assim, o comportamento final é aproximadamente linear:

$$R(T) \approx R_0[1 + \alpha(T - T_0)]. \tag{10}$$

## 1.3 Condução nos semicondutores

Para um semicondutor intrínseco, a concentração intrínseca de portadores  $n_i(T)$  (número de eletrões ou lacunas num semicondutor puro a uma dada temperatura T) e a condutividade  $\sigma(T)$  (capacidade do material conduzir corrente elétrica) são, respectivamente,

$$n_i(T) \propto T^{3/2} \exp\left(-\frac{E_g}{2k_B T}\right), \qquad \sigma(T) = q(\mu_n n + \mu_p p).$$
 (11)

Aqui,  $E_g$  é a largura da banda proibida (em joules ou eV),  $k_B$  é a constante de Boltzmann  $(1.38 \times 10^{-23} \text{ J/K})$ , q é a carga elementar do eletrão  $(1.6 \times 10^{-19} \text{ C})$ ,  $\mu_n$  e  $\mu_p$  são as mobilidades dos eletrões e das lacunas, e n e p são as concentrações de eletrões e lacunas.

No regime intrínseco,  $n = p = n_i(T)$ , pelo que a resistividade decresce exponencialmente com a temperatura [7, 8, 10]. Os valores de densidade de carga para semicondutores intrínsecos, conhecidos como **densidade de portadores intrínsecos**  $(n_i)$ , são extremamente dependentes do material e, especialmente, da temperatura.

Estes valores são a concentração de eletrões (n) e lacunas (p) num semicondutor puro, onde  $n = p = n_i$ .

Semicondutor	$E_g \text{ em eV}$	$n_i \ { m em} \ { m cm}^{-3}$
Germânio (Ge)	0.66	$2.4 \times 10^{13}$
Silício (Si)	1.12	$1.0 \times 10^{10}$
Arsenieto de Gálio (GaAs)	1.42	$1.8 \times 10^{6}$

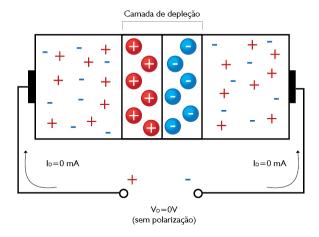


Figura 2: Mecanismos da junção P-N: camada de depleção.

Dopagem: Modificação Estratégica das Propriedades Eletrónicas A dopagem é o processo intencional de introduzir impurezas em um semicondutor intrínseco. Ao introduzir impurezas aceitadoras em concentração  $N_A$  ou doadoras em concentração  $N_D$ , obtém-se um semicondutor extrínseco. O objetivo é aumentar a densidade de portadores de carga livres, elevando a condutividade em várias ordens de grandeza.

#### Classificação da Dopagem

- Semicondutor do Tipo N (Negativo): Dopado com doadores  $(N_D)$ , que libertam eletrões. Os eletrões são os portadores maioritários.
- Semicondutor do Tipo P (Positivo): Dopado com aceitadores  $(N_A)$ , que criam lacunas. As lacunas são os portadores maioritários.

A Junção p-n: A Fundação da Eletrónica Uma junção p-n é formada pela união de um semicondutor do tipo p (concentração de aceitadores  $N_A$ ) com um semicondutor do tipo n (concentração de doadores  $N_D$ ).

No equilíbrio forma-se uma região de depleção de largura W(T) (zona empobrecida em portadores), um potencial interno  $V_{bi}(T)$  e um campo elétrico interno.

#### Largura da depleção.

$$W(T) = \sqrt{\frac{2\varepsilon_s(T)}{q} \frac{V_{bi}(T) - V}{N_A + N_D} \left(\frac{1}{N_A} + \frac{1}{N_D}\right)}$$
 (12)

onde  $\varepsilon_s(T)$  é a permissividade elétrica do semicondutor, q a carga do eletrão, V a tensão aplicada externamente e T a temperatura.

O potencial interno é

$$V_{bi}(T) = \frac{k_B T}{q} \ln \left( \frac{N_A N_D}{n_i^2(T)} \right), \tag{13}$$

onde  $n_i(T)$  é a concentração intrínseca de portadores.

A concentração intrínseca é

$$n_i(T) = \sqrt{N_C(T) N_V(T)} \exp\left[-\frac{E_g(T)}{2k_B T}\right], \tag{14}$$

com  $N_C(T)$  e  $N_V(T)$  as densidades efetivas de estados na banda de condução e de valência:

$$N_C(T) = 2\left(\frac{2\pi m_e^* k_B T}{h^2}\right)^{3/2}, \qquad N_V(T) = 2\left(\frac{2\pi m_h^* k_B T}{h^2}\right)^{3/2},$$

onde  $m_e^*$  e  $m_h^*$  são as massas efetivas do eletrão e da lacuna, e h é a constante de Planck.

A largura de banda proibida varia com T pela equação de Varshni:

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{\alpha_V T^2}{T + \beta_V},$$
 (15)

com  $E_g(0)$  o banda proibida a 0 K e  $\alpha_V$ ,  $\beta_V$  parâmetros empíricos.

Corrente inversa numa junção p-n Sob polarização inversa  $V_R$ , a corrente é

$$I_R(V_R, T) = -\left[qA \frac{n_i(T)}{\tau_g(T)} W(V_R) + qA \left(\frac{D_n n_i^2(T)}{L_n N_A} + \frac{D_p n_i^2(T)}{L_p N_D}\right)\right],\tag{16}$$

onde A é a área da junção,  $\tau_g$  é o tempo de vida de geração,  $D_n$  e  $D_p$  os coeficientes de difusão de eletrões e lacunas, e  $L_n = \sqrt{D_n \tau_n}$  e  $L_p = \sqrt{D_p \tau_p}$  os comprimentos de difusão (dependentes dos tempos de vida  $\tau_n$  e  $\tau_p$ ).

**Dependência na temperatura** Tendo enconta a equação 16 e simplificando o  $(I_R)$  obtêmse:

$$I_R(T) \propto e^{-E_g/\eta k_B T}$$
 (17)

onde 
$$\eta = \begin{cases} 1, & \text{difusão,} \\ 2, & \text{geração na depleção.} \end{cases}$$

## 2 Preparação e Montagem

#### Material

- Placa de aquecimento
- Gobelé com óleo de silicone
- Termómetro digital com sensor de termopar
- Medidor LCR
- Fonte de tensão DC (±15 V)
- Multímetro digital com escala para microamperes  $(\mu A)$
- Amostras: enrolamento de fio de cobre e díodo de silício (ex. 1N4007)
- Suportes e cabos de ligação

Montagem Experimental A montagem consiste num banho térmico previamente preparado, no qual as duas amostras estão imersas e conectadas aos respetivos conectores. A ligação destes conectores aos instrumentos de medição deve ser efetuada pelo utilizador. O aquecimento é realizado de forma gradual, de modo a garantir o equilíbrio térmico do sistema.

#### Nota Importante

É essencial assegurar que o termopar do sistema se encontra posicionado no centro do líquido (óleo de silicone), de forma a garantir que a temperatura medida corresponde efetivamente à temperatura real do banho térmico.

No caso do **diodo**, a medição deve ser realizada no **sentido contrário**, assegurando que se encontra na condição de polarização inversa adequada à experiência.

Como boa prática de laboratórios de Física, não deve ligar nenhum aparelho até o docente certificar o circuito!!!

A utilização de um medidor RLC apresenta vantagens relevantes relativamente à medição em corrente contínua (DC). Em primeiro lugar, permite operar fora da região DC/baixas frequências, onde o ruído 1/f é significativamente mais elevado, comprometendo a razão sinal-ruído e aumentando a incerteza na determinação da resistência elétrica. Em segundo lugar, a medição com sinal alternado evita o aparecimento de forças eletromotrizes (efeito de Seebeck) nos contactos, induzidas pela acumulação de cargas e gradientes térmicos locais, fenómeno que tipicamente afeta medições realizadas em regime DC.

No protocolo experimental, ao referir a utilização do medidor RLC, considera-se suficiente indicar que a motivação para esta escolha foi a de aumentar a razão sinal-ruído na determinação da resistência. Quanto ao princípio de funcionamento, pode ser remetido o link que já constava na versão anterior do protocolo.

Importa ainda ter em consideração que o óleo de silicone apresenta uma capacidade calorífica relativamente baixa (cerca de  $1, 5-1, 7 \, \mathrm{J} \, \mathrm{g}^{-1} \, \mathrm{K}^{-1}$ ) quando comparado com a água  $(4, 18 \, \mathrm{J} \, \mathrm{g}^{-1} \, \mathrm{K}^{-1})$ . No entanto, devido à sua baixa condutividade térmica e à elevada viscosidade, a dissipação de calor para o meio envolvente é menos eficiente, o que faz com que o óleo de silicone **arrefeça mais lentamente** do que a água.

## 3 Procedimento Experimental

#### Procedimento

 Preparação Inicial: Monte o circuito de acordo com o necessario de forma a ficar idêntico a figura 3.

Certifique-se de que a polarização do díodo é inversa e que os instrumentos estão nas escalas corretas.

### 2. Fase de Aquecimento:

- Ligue a placa de aquecimento e aqueça o óleo lentamente. O aquecimento lento é essencial para que o sistema esteja mais próximo do equilibrio térmico possivel.
- Registe os valores iniciais de temperatura (T), resistência  $(R_{Cobre})$  e corrente  $(I_{Diodo})$  e o tempo (s). Registe os valores de T (°C) de acordo com o que achar mais acertado.

#### 3. Fase de Arrefecimento:

- Quando chegar a cerca de 70 °C, desligue o disco e após algum tempo, sem deixar ultrapassar os 100 °C, retire cuidadosamente recorrendo as pegas térmicas, o gobelé do disco para a placa de cortiça (bem afastado da placa).
- Continue a registar os valores de  $R_{Cobre}$ ,  $I_{Diodo}$  e o tempo à medida que a temperatura diminui.

#### 4. Aquecimento rápido

- 5. Nesta fase ligue a placa de aquecimento e aqueça o óleo na potência máxima.
- 6. Registe os valores iniciais de temperatura (T), resistência  $(R_{Cobre})$  e corrente  $(I_{Diodo})$  e o tempo (s). Registe os valores de T (°C) de acordo com o que achar mais acertado.

## 4 Análise de Dados e Questões de Discussão

#### 1. Análise do Fio de Cobre:

• Crie um gráfico da **resistência**  $(R_{Cobre})$  em função da **temperatura** (T) em graus Celsius.



Figura 3: Figura ilustrativa da montagem experimental a realizar.

- Ajuste uma linha reta a estes dados e determine o declive e a ordenada na origem.
- Calcule o coeficiente de temperatura da resistência,  $\alpha$ .
- Para a resistividade devida aos fonões (ρ<sub>fonões</sub>), use o modelo de Bloch-Grüneisen (Equação (3)) e o valor de referência para a temperatura de Debye do cobre, Θ<sub>D</sub> ≈ 343 K e simule a curva esperada.
- Discuta a validade do modelo de Bloch-Grüneisen, comparando a curva de resistência experimental com a curva teórica simulada. Analise em que regimes de temperatura (alta ou baixa) o modelo se alinha mais com os seus dados.
- compare e comente os resultados obtidos quer no aquecimento lento vs arrefecimento, e o aquecimento rápido vs aquecimento lento.
- Utilizando um multímetro portátil de mão meça diretamente a resistência do fio de cobre e discuta o resultado obtido com o sistema RC.

#### 2. Análise do Díodo Semicondutor:

- Represente graficamernte a dependência na temperatura e os resultados obtidos. Comente os resultados.
- Calcule a largura da banda proibida (banda proibida)  $E_g$  do semicondutor.
- $\bullet$  Compare o valor de  $E_g$  obtido com o valor de referência para o silício. Discuta estes resultados.

## 5 Relevância e Implicações Tecnológicas

A fenomenologia termorresistiva observada em metais e semicondutores não se restringe ao domínio da física teórica. A sua compreensão e manipulação constituem a base para o desenvolvimento e otimização de uma vasta gama de dispositivos e sistemas de alta tecnologia, impactando diretamente a engenharia e a eletrónica moderna.

## 5.1 Implicações Tecnológicas em Metais

A dependência linear e previsível da resistividade de um metal com a temperatura é uma propriedade intrínseca que é aproveitada para calibração e deteção de alta precisão.

- Sensores de Temperatura de Elevada Precisão (RTDs): Sensores de platina (Pt100, Pt1000) e outros metais são usados como RTDs (Resistance Temperature Detectors) em ambientes onde é necessária uma precisão e estabilidade térmica superiores. A sua aplicação abrange a indústria aeroespacial, a calibração de equipamentos científicos e o controlo de processos em reatores nucleares e em criogenia, onde a linearidade da resistência é um parâmetro crítico.
- Gestão Térmica de Dispositivos: O conhecimento do aumento da resistência em condutores é vital no projeto de sistemas de gestão térmica. Em processadores de computadores (CPUs) e GPUs de alto desempenho, a resistência das interconexões metálicas aumenta com a temperatura, afetando a velocidade do sinal. O monitoramento da resistência, por conseguinte, é um método de diagnóstico térmico para evitar o sobreaquecimento e garantir a fiabilidade operacional do dispositivo.

## 5.2 Implicações Tecnológicas em Semicondutores

O comportamento exponencial da condutividade de um semicondutor com a temperatura é o que define as suas aplicações mais sofisticadas, mas também impõe os maiores desafios em termos de projeto e engenharia.

• Dispositivos de Potência: A corrente de saturação inversa (corrente de fuga), que aumenta exponencialmente com a temperatura, é um parâmetro crítico em dispositivos de potência como MOSFETs e IGBTs. Em aplicações de alta tensão e corrente, o aumento da temperatura pode levar ao thermal runaway, um fenómeno de instabilidade em que o aumento da temperatura gera mais corrente de fuga, que por sua vez gera mais calor, resultando na falha catastrófica do componente. A engenharia de potência dedica um esforço substancial para mitigar esta dependência.

- Optoelectrónica: A energia do banda proibida ( $E_g$ ) de semicondutores como o arsenieto de gálio (GaAs) e o nitreto de gálio (GaN) é a base de funcionamento de diodos emissores de luz (LEDs) e de diodos laser. A temperatura afeta diretamente a energia do banda proibida, alterando a cor (comprimento de onda) e a eficiência luminosa do dispositivo. A gestão térmica é, portanto, essencial para manter a estabilidade de cor em ecrãs de alta definição e a precisão de feixes laser em sistemas de comunicação por fibra ótica.
- Sensores MEMS: Em sistemas microeletromecânicos (MEMS), a variação térmica de um semicondutor é usada para criar sensores. Por exemplo, em sensores de fluxo de ar, micro-resistências de silício são usadas como elementos de aquecimento e de deteção para medir a velocidade do ar com base na dissipação de calor. Esta capacidade de integração funcional a nível microscópico demonstra o elevado controlo que se alcançou sobre as propriedades térmicas dos semicondutores.

## Referências

- [1] C. Kittel, Introduction to Solid State Physics, 8th ed., Wiley, 2005.
- [2] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, Solid State Physics, Holt-Saunders, 1976.
- [3] P. Drude, "Zur Elektronentheorie der Metalle," Annalen der Physik 306 (1900) 566–613.
- [4] A. Sommerfeld, "Zur Elektronentheorie der Metalle auf Grund der Fermischen Statistik," Zeitschrift für Physik 47 (1928) 1–32.
- [5] F. Bloch, "Zum elektrischen Widerstandsgesetz bei tiefen Temperaturen," Zeitschrift für Physik 59 (1930) 208–214.
- [6] E. Grüneisen, "Theorie des elektrischen Widerstandes in Metallen," Annalen der Physik 408 (1933) 530–540.
- [7] S. M. Sze, K. K. Ng, Physics of Semiconductor Devices, 3rd ed., Wiley, 2006.
- [8] B. G. Streetman, S. Banerjee, Solid State Electronic Devices, 7th ed., Pearson, 2015.
- [9] S. M. Sze, Semiconductor Devices: Physics and Technology, 2nd ed., Wiley, 2001.
- [10] D. A. Neamen, Semiconductor Physics and Devices, 4th ed., McGraw-Hill, 2012.

## 6 Anexo

Por que um Medidor em Corrente Alternada?