

Estudo computacional das propriedades térmicas de sólidos - Análise dos Resultados

Ana Luz Damasceno Gonçalves Silva

Departamento de Física, Universidade Federal de Minas Gerais

20 de dezembro de 2022

1 Silício

O silício é um material semicondutor muito abundante na natureza e, por isso, é amplamente utilizado na fabricação de diversos dispositivos eletrônicos, como os chips.

O silício tem uma estrutura cristalina parecida com a do diamante, se organizando a seguinte maneira:

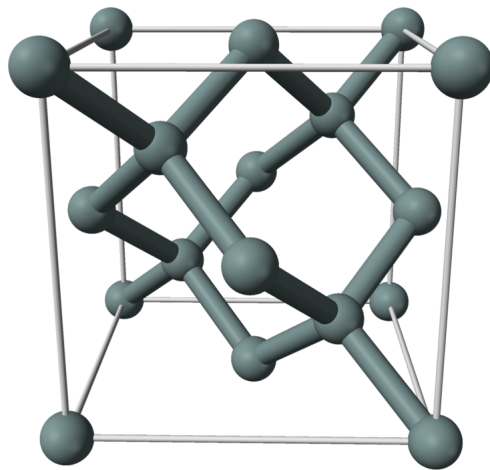


Figura 1: Estrutura cristalina do Silício

Os resultados obtidos para as propriedades do Silício foram os seguintes:

Propriedades térmicas do Silício

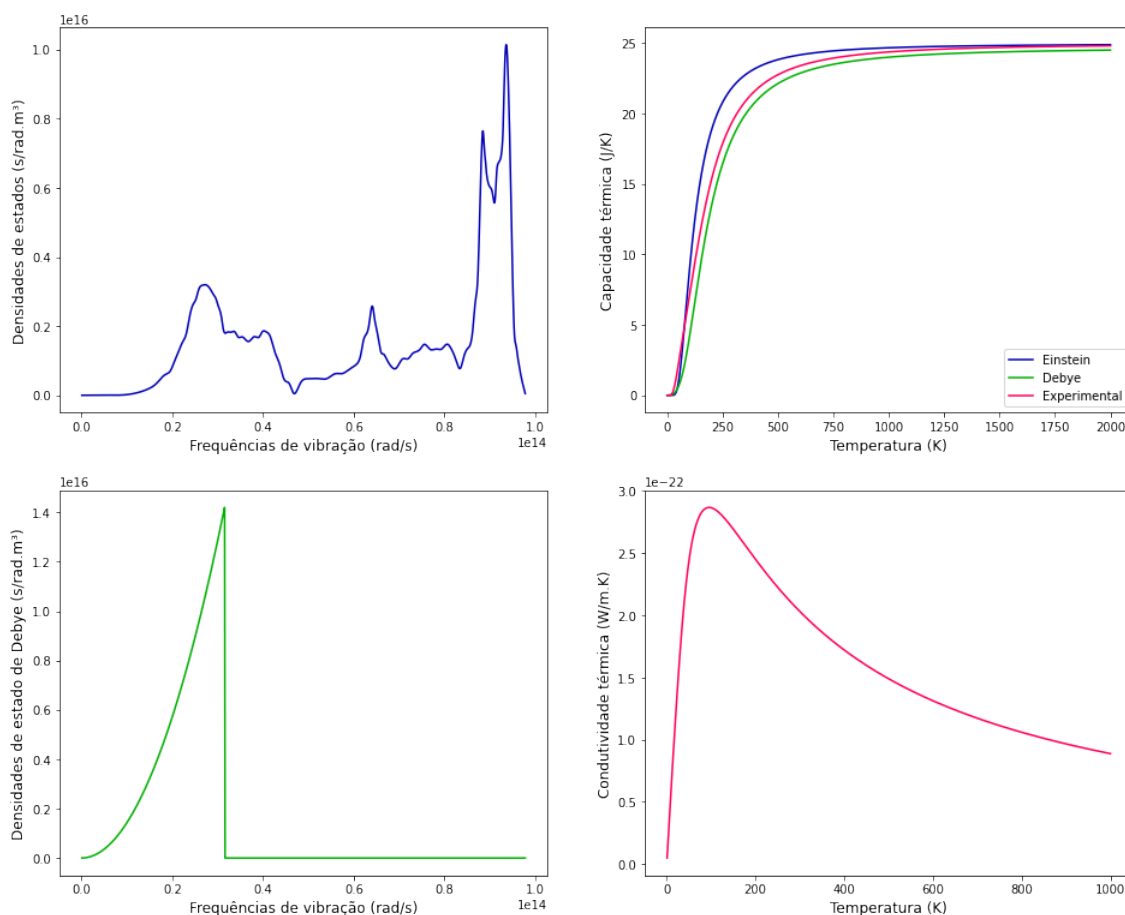


Figura 2: Propriedades térmicas do Silício calculadas a partir dos métodos computacionais desenvolvidos

2 Nitreto de Gálio

O nitreto de gálio, ou GaN, é um semicondutor duro e mecanicamente estável. É um material mais eficiente que o silício em termos energéticos, exigindo menos energia para o seu aquecimento, menos gastos com sistemas de resfriamento, possibilitando também o desenvolvimento de sistemas menores. Apesar de ser um material mais caro que o silício, a sua manutenção e utilização para a fabricação de dispositivos exigem menos custos, todavia as suas propriedades são menos dominadas que as do silício.

Este material tem uma estrutura cristalina de wurtzita, que é um mineral que consiste de sulfeto de zinco e ferro, tendo a seguinte forma:

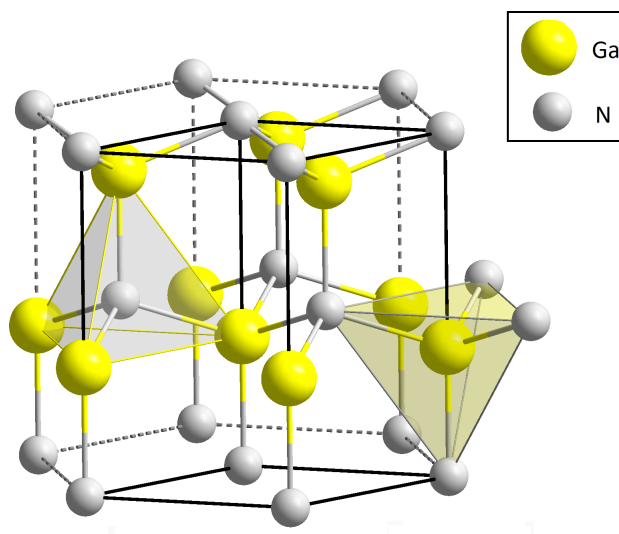


Figura 3: Estrutura cristalina do Nitreto de Gálio

Os resultados obtidos para as propriedades deste material foram:

Propriedades térmicas do GaN

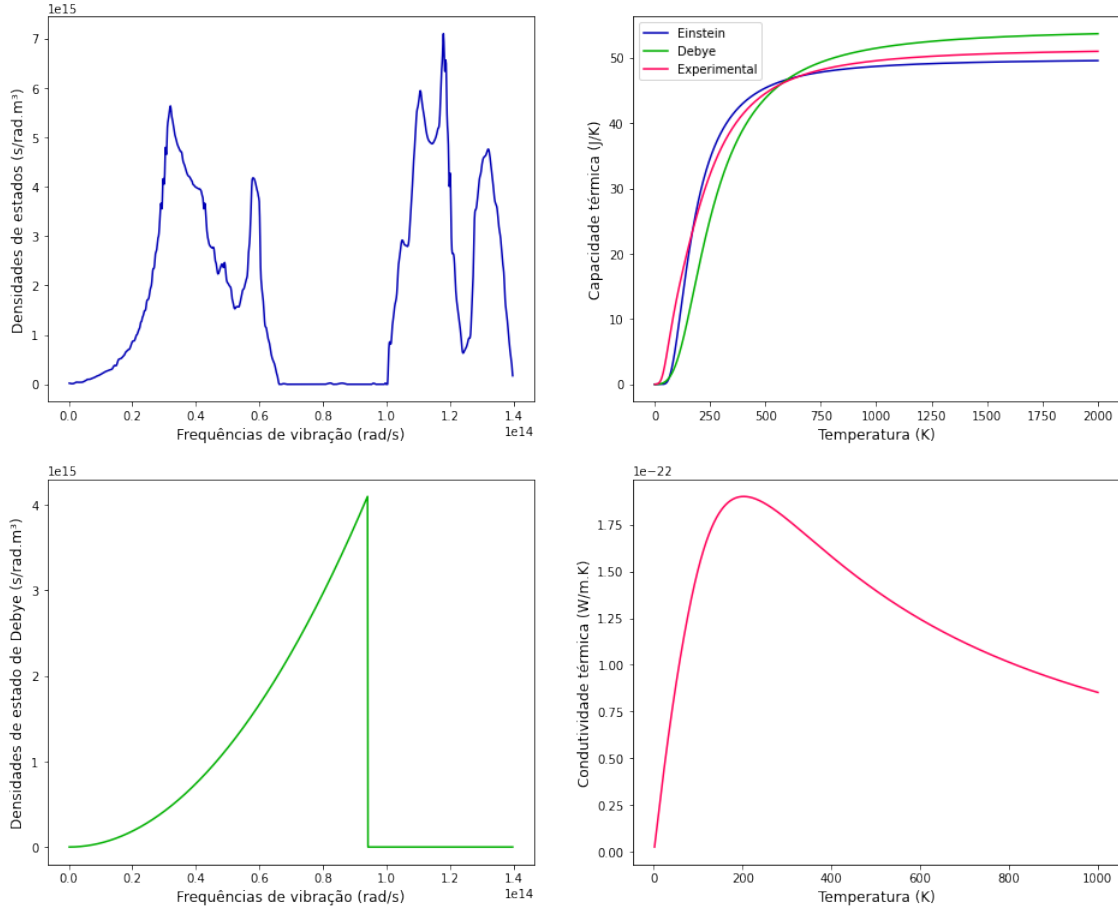


Figura 4: Propriedades térmicas do Nitreto de Gálio calculadas a partir dos métodos computacionais desenvolvidos

3 Óxido de Zinco

O óxido de zinco é um material com diversas aplicações, que tem um baixo custo e que está começando a ter as suas propriedades de semicondutor exploradas. É um material com boa transparência e forte luminescência à temperatura ambiente, sendo muito vantajoso na construção de LEDs, finalidade para a qual o Silício não é muito bom, uma vez que este último é muito ineficiente para a emissão de luz.

3.1 Rocksalt

Uma das estruturas cristalinas que o óxido de zinco pode assumir é a chamada *rocksalt*, ou pedra de sal, que é assim chamada por ser a forma de organização do NaCl. Esta organização do ZnO tem a seguinte forma:

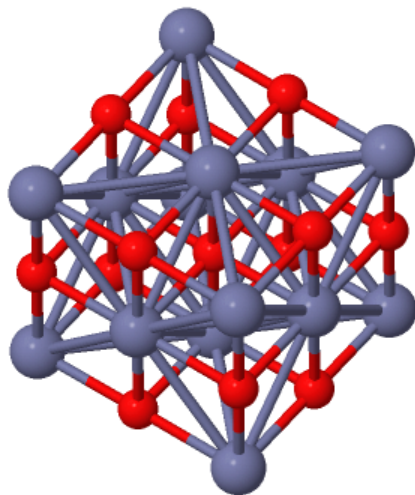


Figura 5: Estrutura cristalina do Óxido de Zinco de forma rocksalt

Os resultados obtidos para esta forma do ZnO foram:

Propriedades térmicas do ZnO Rocksalt

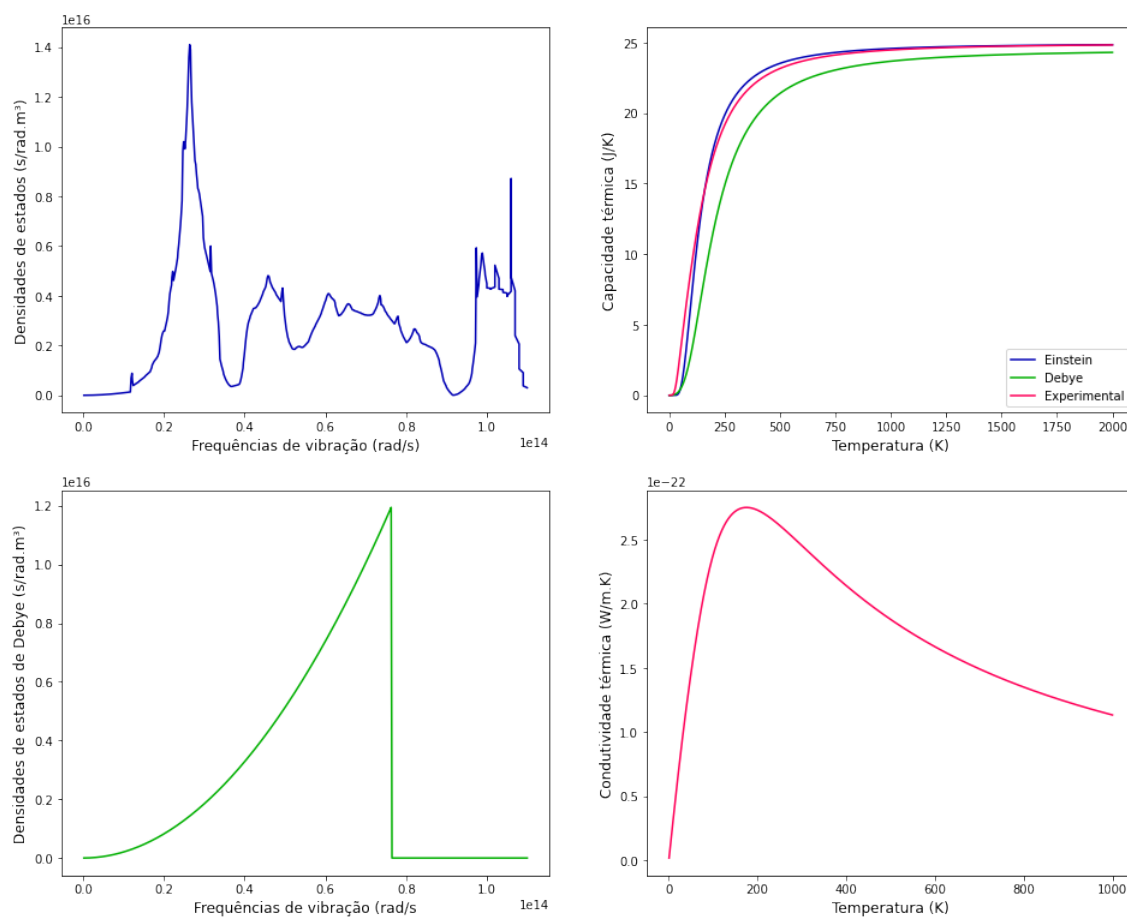


Figura 6: Propriedades térmicas do Óxido de Zinco, de estrutura do tipo rocksalt, calculadas a partir dos métodos computacionais desenvolvidos

3.2 Zinoblende

Outra organização estrutural do óxido de zinco encontrada na natureza é do tipo *zinoblende*, que é a estrutura do sulfeto de zinco. O ZnO desta forma tem a seguinte estrutura:

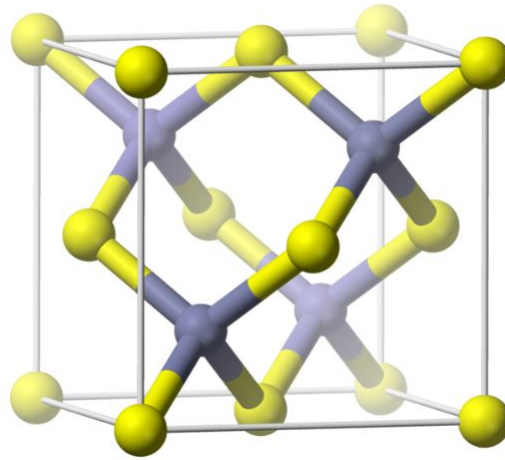


Figura 7: Estrutura cristalina do Óxido de Zinco de forma zincblende

Os resultados para este material foram:

Propriedades térmicas do ZnO Zincblende

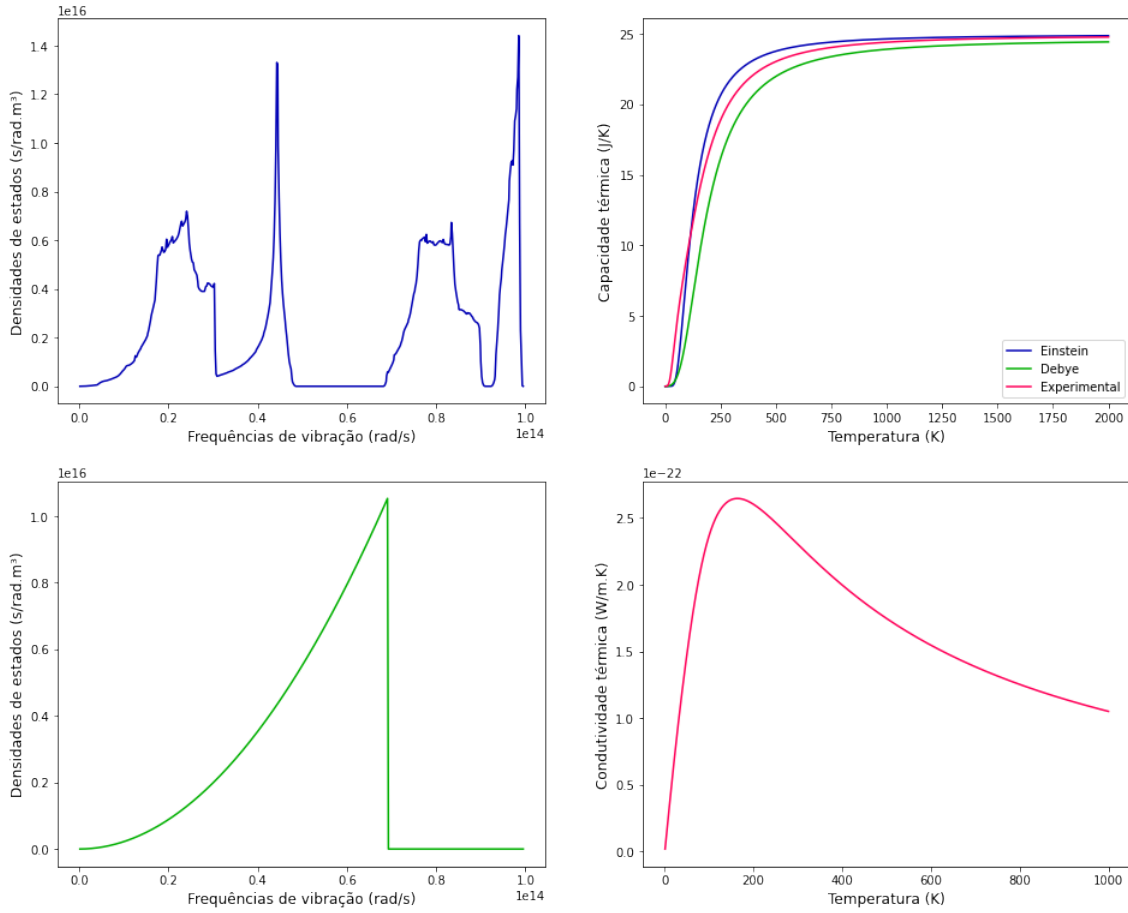


Figura 8: Propriedades térmicas do Óxido de Zinco, de estrutura do tipo zincblende, calculadas a partir dos métodos computacionais desenvolvidos

4 Comparação dos Resultados

Foi possível também, a partir dos resultados obtidos, comparar também as condutividades térmicas encontradas para os diferentes sólidos utilizados.

Verifica-se pelo gráfico abaixo que, apesar dos valores dos picos de condutividade terem sido diferentes, todos ocorrem a temperaturas muito próximas, o que pode ser devido ao fato de que as constantes utilizadas na Teoria de Callaway, teoricamente, são diferentes para cada material, porém, devido a limitações experimentais na realização do projeto e da dificuldade para encontrar tais dados, foram utilizados os mesmos valores para todos os sólidos.

Condutividade térmica utilizando a Teoria de Callaway para diferentes materiais

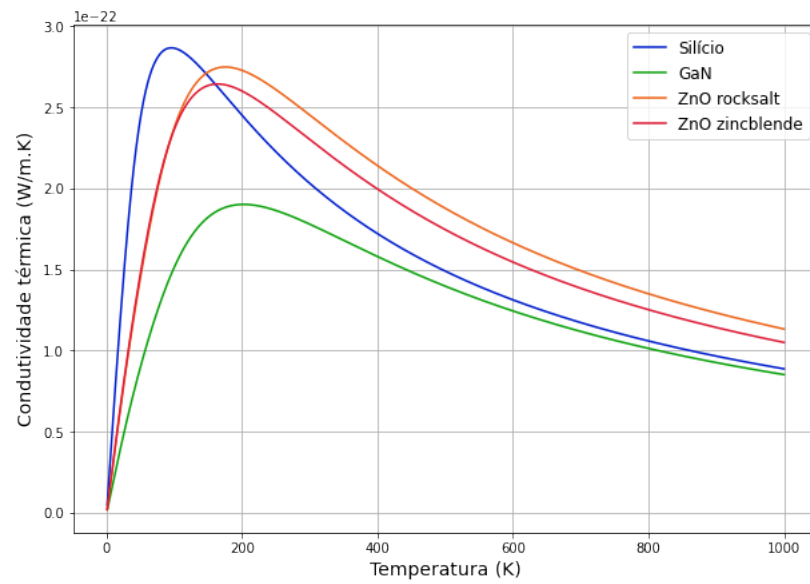


Figura 9: Plotagem das condutividades térmicas calculadas em um mesmo gráfico, para que seja mais fácil comparar os resultados