

Universidade Federal do Espírito Santo - UFES
Centro de Ciências Exatas - CCE
Programa de Pós-Graduação em Física - PPGFIS

Kim Okada

Transporte Eletrônico em Nanotransistores.

**Vitória
2020**

Kim Okada

Transporte Eletrônico em Nanotransistores.

Dissertação apresentada ao Programa de PósGraduação em Física do Centro de Ciências Exatas da Universidade Federal do Espírito Santo como requisito parcial para a obtenção do grau de Mestre em Física, na área de Física Teórica.

Orientador: Prof. Dr. Humberto Belich Junior

Vitória
2020

Kim Okada

Transporte Eletrônico em Nanotransistores.

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Espírito Santo como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Física.

Prof. Dr. Humberto Belich Junior
Universidade Federal do Espírito Santo -
UFES

Prof. Dr.
Universidade Federal do Espírito Santo -
UFES

Prof. Dr.
Universidade Federal do Espírito Santo -
UFES

Vitória
2020

A minha família e amigos que, sem dúvida alguma,
fizeram parte na minha formação como pessoa.

Agradecimentos

Agradeço primeiramente a Deus pois, sem ele não estaria onde estou.

Agradeço meus pais que me deram todo o apoio e estrutura não só na minha caminhada como pessoa mas na minha jornada acadêmica. Agradeço aos meus irmãos, que mesmo de longe sempre torceram por mim.

Agradeço à minha namorada/esposa que por vezes compreendeu minha falta junto da criação dos nossos filhos.

Agradeço ao meu orientador e amigo desde tempos da Toca do Urso, Prof. Dr. Humberto Belich pelo apoio, pelas lições que pude absorver durante todo tempo de graduação/orientação e pela paciência durante a elaboração desse trabalho.

Agradeço aos meus professores de mestrado Prof. Dr. Vinícius Cândido Mota e ao, infelizmente finado, Prof. Dr. Antônio Brasil Batista, que tiveram papel importante nessa caminhada.

Agradeço aos meus colegas de mestrado, em especial Alexandre Venturim e Wesllen Rupf, pela ajuda nos momentos de dificuldades, pelo companheirismo e pelo apoio inestimável durante nossa caminhada.

Agradeço meus colegas pós UFES: Gava, Alan, Matheus, Pedro, Mãozinha, Souza, Messias, Josué, Gnomo e Haddad pelas discussões e pela ajuda na construção de alguma parte desse trabalho.

Por fim, agradeço ao Programa de Pós-Graduação em Física da UFES e ao CNPq pelo importante apoio financeiro.

“Se cheguei até aqui foi porque me apoiei no ombro dos gigantes”.

Isaac Newton

Resumo

Neste trabalho faremos uso de técnicas desenvolvidas nos fundamentos da nanoeletrônica, para tratar de uma nova abordagem da condutância nos circuitos em nanoescala. Quando partimos para nanoescalas, devemos fazer algumas modificações na física que conhecemos, exigindo uma transição da física clássica para a física quântica. Também apresentaremos as propriedades da condução eletônica em nanotransistores e as origens da resistência quântica, e por consequência vamos comparar alguns conceitos pré estipulados com novos conceitos. A maior parte deste trabalho é embasada nos livros publicados pelo físico Supriyo Datta, que é o pioneiro nesse estudo.

Abstract

In this work we will make use of techniques developed in the fundamentals of nanoelectronics, to address a new approach to conductance in circuits without nanoscale. When we go to nanoscales, we must make some modifications in the physics that we know, requiring a transition from classical physics to quantum physics. In this work we will present the properties of electron conduction in nanotransistors and the origins of quantum resistance, and consequently we compared some pre-stipulated concepts with new concepts. Most of this work is based on books published by the physicist Supriyo Datta, who is the pioneer in this study.

Sumário

Agradecimentos

Lista de Figuras

1	Introdução	13
2	O Atomismo	17
2.1	Teoria atômica	17
2.2	Modelos atômicos	18
2.2.1	Modelo de Dalton	18
2.2.2	Modelo de Thomson	19
2.2.3	Modelo de Rutherford	21
2.2.4	Modelo de Rutherford – Bohr	22
2.2.5	Modelo de Sommerfeld	27
3	Conceitos Fundamentais	31
3.1	A Teoria Cinética dos Gases	31
3.2	O Livre Caminho Médio	37
3.3	Movimento Browniano	40
3.3.1	A relação de Einstein	41
3.4	Modelo de Drude	43
3.5	Distribuição de Maxwell - Boltzmann	49
3.5.1	Distribuição de Maxwell para a velocidade das moléculas	53
3.6	Distribuição de Fermi-Dirac	59

4	Propriedades da condutância nos Nanotransistores	65
4.1	Transistor de Efeito de Campo	65
4.2	Condutância	68
4.2.1	Introdução da Condutância Balística	69
4.2.2	Interpretação da Resistência Balística	70
4.2.3	Onde se encontra a resistência?	73
4.3	Resistores Elásticos	76
4.4	Teorias de Transporte	78
4.4.1	Fluxo de Elétrons	80
4.4.2	Função de Fermi	82
4.5	Condução nos Circuitos	85
5	Transporte Balístico e Difusivo	89
5.1	Tempo de Transporte	89
5.1.1	Regime balístico	90
5.1.2	Regime Difusivo	90
5.2	Condutância	92
5.2.1	Condutância Balística	93
5.2.2	Condutância Difusiva	93
5.3	Média angular de \bar{D} e \bar{u}	96
6	Conclusão	103
	Referências Bibliográficas	104

Lista de Figuras

1	Réplica do primeiro transístor apresentado em 1947 na Bell Laboratories	14
2	Diagrama de níveis de energia para o átomo de hidrogênio	25
3	Diagrama de níveis de energia para emissão fotônica	27
4	Órbitas elípticas de Bohr-Sommerfeld para os três primeiros valores do número quântico principal n	30
5	Moléculas de gás em recipiente cilíndrico.	33
6	Moléculas de gás se deslocando.	38
7	Representação de uma molécula com diâmetro $2d$ e sua área de colisão efetiva.	38
8	A figura abaixo representa uma trajetória browniana típica entre dois pontos A e B durante um tempo de observação macroscópico.	41
9	Esquema mostrando o sistema experimental que permite fazer um análogo mecânico para a condutividade dos metais.. . . .	45
10	Gráfico da distribuição de velocidades de Maxwell - Boltzmann.	50
11	Distribuição de velocidades de Maxwell	51
12	Gráfico para as velocidade das 3 dimensões.	54
13	Gráfico da distribuição de velocidades de Maxwell	55
14	Gráfico com a velocidade média, velocidade quadrática média e a velocidade mais provável.	58
15	Esquema de desdobramento de níveis de um sistema de dois átomos. Baseado na figura 10.18, Beiser.	60
16	Esquema de desdobramento de níveis para o Li^3	60
17	Esquema de desdobramento de níveis para o Be^4	61

18	Esquema de desdobramento de níveis para o C^6	62
19	Distribuição de Fermi-Dirac para diferentes temperaturas. No zero absoluto, todos os estados com $E < E_F$ estão ocupados, enquanto os estados $E > E_F$ estão vazios.	64
20	(a) Transistor de Efeito de Campo (FET) Basicamente é um resistor composto por um canal que liga dois contatos, a fonte e o dreno, que estão ligados por uma bateria. (b)	66
21	Esquema de um switch com um par de transistor.	67
22	Condutor da área superficial A e comprimento L	68
23	A cada salto de geração, o comprimento do canal do transistor foi ficando cada vez menor.	69
24	Representação esquemática	74
25	Perfil de um condutor com uma falha em seu interior.	76
26	Em um resistor elástico as trocas de calor se concentram nos contatos.	76
27	Esquema que representa um resistor longo análogo à resistores elásticos em série.	77
28	a)resistor elástico com cais de energias E_1 , E_2 e E_3 independentes e sem fluxo de elétrons entre eles. b) em processos inelásticos aparece uma corrente vertical como se novos resistores aparecessem no canal.	77
29	Esquema de processo inelástico.	78
30	Moléculas de gás em recipiente cilíndrico.	80
31	Gráfico da Densidade de estados pela energia.	81
32	Condutores com potencial eletroquímico em equilíbrio.	82
33	Representação gráfica da função de Fermi.	83
34	Função de Fermi normalizada.	84
35	Quando uma voltagem é aplicada sobre os contatos, há um decréscimo do potencial eletroquímico no contato positivo.	85
36	Esquema de transporte balístico em um condutor.	90
37	Esquema do transporte difusivo em um condutor.	90

38	Condutores de 3D, 2D e 1D	95
39	Média angular de \bar{D} e \bar{u} para 1D	96
40	Média angular de \bar{D} e \bar{u} para 2D	97
41	Média angular de \bar{D} e \bar{u} para 3D.	98
42	O gráfico mostra que a condutância balística é linear com a área do condutor.	100
43	Experimentos demonstraram que a condutância não era linear, era proporcional a múltiplos inteiros.	100
44	Condutor de 1D.	101
45	Representação de M canais de condução de 1D equivalentes à um condutor de 3D.	101

1 *Introdução*

Em 29 de Dezembro de 1959, Richard Feynman [1] deu uma palestra na Caltech chamada "There's plenty of room at the botton"(Tem bastante espaço lá em baixo) [2]. Nessa palestra ele se questionou quais seirão as possibilidades e desafios de escrever toda a Enciclopédia Britânica na cabeça de um alfinete.

Naquela época, Feynman já sabia que a manipulação atômica ainda estava longe de ocorrer, mas já havia o questionamento de quão pequenas poderiam se tornar as máquinas [3]. Um ponto importante previsto por Feynman, foi que quando você vai para diferentes escalas, coisas diferentes em proporções diferentes se tornam importantes.

Hoje, podemos armazenar toda a Enciclopédia Britânica em um simples Pen drive, e ainda sobriaria espaço. A última edição em Inglês da Enciclopédia Britânica tinha 32 volumes com 32.640 páginas [4]. Para se ter uma base de comparação, um Pen drive de 1 Gb é capaz de armazenar 100.000 páginas, ou seja, seria possível colocar quase 3 Enciclopédias Britânicas em um "espaço"de 1 centímetro quadrado e sair carregando no bolso.

Isso só é possível graças aos avanços da tecnologia, mais especificamente pela criação dos transistores. Desde a criação dos transistores até sua utilização em escala doméstica, se passaram aproximadamente 10 anos e nesse meio tempo o desenvolvimento dos transistores sofreram inúmeros tipos de processos e materiais.

No início do século a companhia AT&T (American Telephone and Telegraph) estava ampliando e popularizando a rede telefônica de todo os Estados Unidos, com a demanda de pessoas querendo se comunicar por todo o país, surgiu a necessidade de transmitir a voz para lugares cada vez mais distantes, então para suprir essa necessidade, foi criado um tudo à vácuo, ou mais popularmente conhecida, a válvula termiônica, que ampliava o impulso e conseqüentemente melhorava o sinal das telecomunicações. Por volta de 1936 na Bell Laboratories, três cientistas: William

Shockley, John Bardeen e Walter Brattain [5] Estavam desenvolvendo um dispositivo que tinha a mesma função da válvula, mas com a vantagem de ser menor e mais eficiente. No final de 1947 os pesquisadores tiveram sucesso no desenvolvimento do dispositivo, "nascendo" assim o primeiro transistor. Posteriormente, em 1955 os três cientistas foram homenageados com o Premio Nobel pelo desenvolvimento do dispositivo.



Figura 1: Réplica do primeiro transistor apresentado em 1947 na Bell Laboratories

Mesmo com todo o potencial dos transistores, eles só foram se tornar populares por volta dos anos 50 graças ao rádio transistor desenvolvido pela Sony no Japão. Os primeiros japoneses que leram a notícia dos transistores foram dois cientistas, o professor da universidade de Tohoko, Yasushi Watanabe [6] e o diretor do instituto de tecnologia industrial Sakuji Komagata [7]. É graças aos dois e ao desenvolvimento dos transistores, que a Revolução Industrial no Japão foi possível.

Em outubro de 1957, a União Soviética lançava seu primeiro satélite, o Sputnik. Em resposta, os Estados Unidos tentaram acompanhar a Rússia, mas seus esforços não obtiveram sucesso, a tecnologia soviética estava muito distante de ser alcançada. Mais adiante, em 12 de Abril de 1961 a União soviética lançou um homem ao espaço,

deixando os Estados Unidos ainda mais pra trás na corrida espacial. O cosmonauta Yuri Gagarin [8] foi o primeiro homem a ficar em órbita em torno da Terra.

Frente ao desafio de superar a tecnologia soviética, os Estados Unidos tentaram miniaturizar [9] os dispositivos eletrônicos, dando início a fabricação dos micromódulos que posteriormente, em 1961, iriam evoluir para o circuito integrado, que é basicamente um circuito eletrônico com diversos componentes integrados principalmente transistores, resistores e capacitores.

Com esse avanço na tecnologia americana, foi possível em 16 de Julho de 1969, lançar a Apollo 11 rumo a Lua. O sucesso da missão foi possível graças ao computador de bordo [10] que o módulo lunar possuía. Além de ser extremamente eficiente ele era extremamente pequeno, em seu interior ele possuía 2826 circuitos integrados com 550 transistores, separados por módulos.

É importante destacar que, em 1960 um único circuito integrado custava aproximadamente U\$ 1.000,00, 4 anos mais tarde o preço caiu para U\$ 25,00 e em 1972 o custo caiu ainda mais para U\$ 1,00 cada circuito integrado.

Com a tecnologia avançada e o custo dos circuitos integrados mais baixo, o desafio na época era colocar um maior número de transistores e um espaço cada vez menor. Em 1971 a Intel anuncia seu primeiro microprocessador o Intel 4004 [11]. Nesse microprocessador existiam 100 circuitos integrados com 2.300 transistores em uma placa de apenas 10 microns. Em termos de comparação com a tecnologia atual, hoje nesse mesmo espaço de 10 microns, podemos colocar um pouco mais de 100 mil circuitos integrados. Essa evolução no número de circuitos já tinha sido profetizada na década de 60 pelo presidente da Intel, Gordon Moore, que hoje é conhecida como a Lei de Moore. Em um artigo científico publicado em 1965 [12], Gordon Moore disse que o número de transistores dos chips dobrariam, pelo mesmo custo, a cada ano. Mais tarde em 1975, ele revisou seu artigo para um valor mais realístico e em vez do número de transistores dobrarem a cada 1 ano, eles dobrariam a cada 18 meses. Por incrível que pareça essa Lei ainda é válida até hoje, 50 anos depois de ser profetizada.

O objetivo dessa dissertação é trazer para o leitor uma nova perspectiva da condução elétrica nos semicondutores, mais especificamente nos nanotransistores. Nos primeiros capítulos, serão discutidos os conceitos teóricos, que mais tarde servirão de base para a nossa discussão em relação à nova perspectiva. Conceitos como Livre Caminho Médio, Modelo de Drude, Teoria Cinética dos Gases e outros, serão amplamente discutidos. Nos capítulos posteriores será discutida essa nova

perspectiva, onde será abordado o Fluxo elétrico, o Efeito Joule, a importância do potencial eletroquímico no fluxo elétrico, a estatística de Fermi e por fim será discutido o tempo e o caminho da condução elétrica. Por fim será discutido as aplicações dessa nova perspectiva e os impactos nos dispositivos eletrônicos.

Até a presente data, há pouco material sobre o assunto na literatura, um dos pioneiros dessa nova perspectiva é o engenheiro Supriyo Datta, que em 2005 publicou o livro "Quantum Transport: Atom to Transistor". Nesse livro ele faz uma leitura do transporte eletrônico utilizando muito as funções de Green. Em seu livro mais atual "Lessons from Nanoelectronics: A New Perspective on Transport" de 2012 ele opta por outro caminho, e esse é o livro base utilizado em maior parte do presente texto.

2 O Atomismo

Neste Capítulo discutiremos a teoria do Atomismo e as evoluções dos modelos atômicos com seus respectivos responsáveis, trataremos também dos contextos históricos e suas aplicações.

2.1 Teoria atômica

Hoje é comum citar escalas na ordem de mili, micro, nano e etc. Mas nem sempre foi assim, um dos primeiros filósofos a se questionar até onde podemos dividir um corpo e descobrir qual o menor tamanho possível foi Leucipo de Abdera [13], que deu o pontapé na teoria do atomismo, que relatava que uma matéria pode ser dividida até chegar em uma pequena partícula indivisível chamada átomo. Seguido por seu discípulo Demócrito de Abdera [14], a ideia do atomismo ganhou corpo e relevância por volta de 500 a.c.

Leucipo e Demócrito se perguntaram pela primeira vez se seria possível compreender o mundo que nos cerca a partir do estudo dos seus elementos constituintes. E essa ideia é que está por trás da seguinte pergunta: Será que é possível pegar um objeto macroscópico qualquer, e subdividi-lo a cada passo da maneira a obter um objeto com dimensões da metade do objeto anterior. Será que essa partícula chegará em algum fim, ou seja, em algo indivisível? Obviamente essa pergunta era de natureza especulativa, filosófica, pois até então era impossível realizar tal experimento. A ideia do pensamento atomista se baseava na pergunta do que era a menor parte da matéria, ou seja, quais eram os ‘tijolos primordiais’? As primeiras evidências e respostas para essas perguntas vieram dos trabalhos dos químicos e entre eles podemos destacar: Dalton, Thomson, Rutherford e Bohr.

De acordo com Oki [15], no século XIX a teoria do atomismo foi interpretada pelos cientistas como uma resposta aos resultados obtidos dos dados empíricos, mesmo

que a ideia do átomo ainda fosse de ordem filosófica.

2.2 Modelos atômicos

2.2.1 Modelo de Dalton

O trabalho publicado por Dalton em 1805 [16], propunha que os átomos de elementos diferentes possuem propriedades diferentes entre si, átomos de um mesmo elemento possuem propriedades iguais e de peso invariável, o átomo é a menor porção da matéria, e são esferas maciças e indivisíveis, nas reações químicas, os átomos permanecem inalterados. Além disso Dalton seguindo Lavoisier e Proust propôs a Lei das proporções definidas:

1. Tabela da Lei das proporções definidas

Reagente (Hg)	Reagente (O ₂)	Produto (HgO)
50 g	8 g	58 g
52 g	8 g	58 g HgO + 2 g Hg

Pela tabela, na segunda linha temos que 50 gramas de mercúrio reagindo com 8 gramas de oxigênio resultando em 58 gramas de óxido de mercúrio. Na segunda linha, temos 52 gramas de Mercúrio reagindo com 8 gramas de oxigênio resultando nas mesmas 58 gramas de óxido de mercúrio e com sobra de 2 gramas de mercúrio, ou seja, mantendo-se a massa de Oxigênio fixa e variando a massa de mercúrio, sempre irá ter como produto o óxido de mercúrio e o que for o excesso de mercúrio vai ficar sem reagir.

Seguindo a mesma linha, Dalton enunciou que se uma massa fixa de um elemento se combina com massas diferentes de um segundo elemento para formar compostos diferentes, estas massas (diferentes) estão entre si numa relação de números inteiros pequenos. Essa relação se denomina proporções múltiplas que segue a mesma ideia das proporções definidas. Segue a tabela:

1. Tabela das proporções múltiplas

Reagente (N)	Reagente (O)	Produto (N_2O)
28 g	16 g	N_2O
28 g	32 g	N_2O_2
28 g	48 g	N_2O_3
28 g	64 g	N_2O_4

Pela tabela, podemos notar que a massa do Nitrogênio não sofre alterações, em contrapartida a massa do Oxigênio está variando por números inteiros e pequenos. Essas alterações já são suficientes para mudar o composto. Na segunda linha da tabela temos 28 gramas de nitrogênio reagindo com 16 gramas de oxigênio resultando em Óxido nitroso, na terceira linha dobrou-se as gramas de oxigênio mantendo fixa a massa de nitrogênio, o que resultou no dióxido de dinitrogênio. Seguindo temos na quarta e quinta linha os compostos respectivamente trióxido de dinitrogênio e tetróxido de dinitrogênio.

Por fim no ano de 1808, Dalton propôs a teoria do modelo atômico, onde seu átomo era uma minúscula esfera maciça, impenetrável, indestrutível, indivisível e sem carga. Todos os átomos de um mesmo elemento químico são idênticos. Seu modelo atômico foi chamado de **modelo atômico da bola de bilhar** [17].

2.2.2 Modelo de Thomson

Por volta de 1838, o físico e químico Michael Faraday [18] deu início as pesquisas com cargas elétricas submetidas a baixas pressões. Nessa época muitos cientistas estavam pesquisando a condução de eletricidade nos gases. As experiências eram realizadas em ampolas de vidro com gases rarefeitos em seu interior e providas com terminais em suas extremidades ligados em uma bateria, denominados anodos e catodos. Quando Faraday ligava a bateria dos seus terminais um brilho surgia perto da placa carregada positivamente (catodo) e essa luminosidade ele deu o nome de brilho catódico, notou também que esse brilho interagia com objetos carregados, ou seja, o brilho se orientava a favor ou contra a posição do objeto carregado.

Quando um objeto carregado positivamente se aproximava do brilho, ele era atraído para o objeto e quando o objeto era negativamente carregado ele se afastava.

Faraday então pode associar que o brilho estava relacionado com “coisas” carregadas negativamente.

Dois anos depois Crookes [19] aperfeiçoa a ampola. O vácuo dentro dela se torna mais forte e com menos gás dentro do recipiente, o brilho catódico se torna um raio que saía de uma extremidade e atingia a outra. Crookes então deu o nome para esse fenômeno de Raios Catódicos [20]. Crookes assim como Faraday desejava identificar a natureza dos raios catódicos, e em seus experimentos, Crookes assim como Faraday observou que os raios interagiam com objetos carregados. O próximo passo era identificar se os raios se desviavam na presença de um campo magnético. Na época já se tinha o conhecimento da força de Lorentz, Crookes estabeleceu então um campo magnético no interior da ampola e observa que realmente o raio sofria um desvio constatando agora, que os raios eram objetos com carga negativa.

Crookes na sequência, estabeleceu um campo Elétrico e esperava que os raios também se desviassem, mas para sua surpresa nada aconteceu. Os raios incrivelmente só interagiam com campos magnético e não interagiam com campos elétricos, o que seria uma contradição na época pois, a interação deveria ocorrer para os dois casos.

Em 1887 um cientista chamado Joseph John Thomson [21], estava estudando a existência de partículas subatômicas e utilizou a ampola de Crookes para realizar seus experimentos. Nesse período as bombas de vácuo eram mais poderosas e conseguiam tirar mais gás da ampola, com isso o vácuo era mais forte e conseqüentemente em seu interior o gás se tornava mais rarefeito. Em seus experimentos Thomson resolveu a contradição de Crookes pois, dessa vez os raios catódicos eram desviados na presença de um campo elétrico. Percebeu então, que o vácuo antes não era suficiente para que houvesse a interação.

Thomson realizou também outras experiências, em uma delas colocou um aparato que bloqueava uma parte dos raios catódicos e pode observar na região oposta uma sombra, levando a conclusão que os raios se propagavam de forma linear. Em outra experiência colocou na frente dos raios uma ventoinha mecânica de sílica e observou que ela se movia, portanto ele pode concluir que os raios possuíam massa e conseqüentemente eram formados por matéria.

Depois de muitos experimentos, Thomson também conseguiu determinar a relação de carga e massa dessas partículas e com isso identificou que existia alguma coisa a mais e menor do que no modelo de Dalton. Essa nova partícula que compunha

o átomo foi denominada de elétron e possuía carga elétrica negativa.

Dando mais um passo, ele pode concluir que essa nova partícula encontrada independia do material do catodo, ou seja, essa partícula estava presente em todos os materiais. Thomson notou também, que como o átomo era neutro, deveria existir alguma parte carregada com carga positiva, ele portanto definiu que deveria existir essa carga positiva e deu o nome de próton. Concluiu então, que o número de prótons deveria ser igual ao número de elétrons.

Portanto, seu modelo atômico a partir dos experimentos, é semelhante a um pudim de passas.

2.2.3 Modelo de Rutherford

Em 1911, um dos ex alunos de Thomson, chamado Ernest Rutherford [22], concluiu que o modelo de Thomson era incompatível com a natureza. A base para a refutação do modelo atômico anterior foi feita através de uma experiência de espalhamento [23]. Em 1908 Ernest recebeu o prêmio Nobel de química por seus trabalhos envolvendo radioatividade, portanto no período de 1911 já se tinha o conhecimento de radioatividade.

Todas as propostas de Rutherford para a criação do seu modelo atômico foram resultado de um experimento em que ele incidiu feixes de radiação alfa (oriundos de polônio radioativo presente em uma caixa de chumbo) sobre uma fina lâmina de ouro, com uma placa de metal coberta de sulfeto de zinco atrás e nas laterais. O sulfeto de zinco é um sal que, ao receber radiação, brilha e era conhecido que as partículas alfa possuíam carga positiva e massa.

Rutherford observou que parte das partículas alfas atravessavam a lâmina de ouro sem sofrer qualquer desvio como se não houvesse nada no caminho, outras partículas eram desviadas da sua trajetória e o restante, com menor número, eram refletidas.

Rutherford pode concluir que o átomo era composto em sua maioria por espaços vazios, concluiu também que o núcleo é de 10.000 a 1000.000 vezes menor do que o átomo, e que o núcleo é positivo.

Pela experiência, Rutherford pode imaginar que o átomo era composto por um núcleo e seu redor era preenchido por uma nuvem de objetos de massa muito pequena, que nós hoje conhecemos por eletrosfera.

Então em 1911, Rutherford apresentou a sua teoria para o seu modelo atômico, baseado nas análises de sua experiência e afirmou que o modelo vigente até então, também conhecido como "pudim de passas", que foi feito por Thomson, estava incorreto. Rutherford a partir das análises afirmou também, que o átomo não era apenas uma esfera maciça de carga elétrica positiva incrustada com elétrons como dizia Thomson. Segundo Rutherford, o átomo teria na verdade um núcleo de carga elétrica positiva de tamanho muito pequeno em relação ao seu tamanho total, sendo que este núcleo, que conteria praticamente toda a massa do átomo, estaria sendo rodeado por elétrons de carga elétrica negativa, os quais descreveriam órbitas helicoidais em altas velocidades.

Portanto, podemos concluir que para o modelo de Rutherford [24], os elétrons descrevem órbitas circulares estacionárias ao redor do núcleo, sem emitirem nem absorverem energia; fornecendo energia (elétrica, térmica etc) a um átomo, um ou mais elétrons absorvem e saltam para níveis mais afastados do núcleo. Ao voltarem para as suas órbitas originais, devolvem a energia recebida em forma de luz (fenômeno observado, tomando como exemplo, uma barra de ferro aquecida ao rubro); o núcleo é positivamente carregado e a região vazia em torno do núcleo é denominada eletrosfera que seria onde os elétrons estão localizados. Seu modelo ficou conhecido como Modelo Planetário.

2.2.4 Modelo de Rutherford – Bohr

A ideia de Rutherford para o desenvolvimento do seu modelo, foi impulsionada na tentativa de solução do modelo de Thomson. Entretanto, seu modelo atômico também apresentou algumas falhas. Um dos problemas foi a instabilidade do seu modelo planetário [25].

Sabemos que toda partícula em movimento acelerado libera energia em forma de radiação, e como o elétron só possuía energia cinética, essa energia iria ser transformada em radiação e ao passar do tempo a órbita do elétron iria se tornar menor até que o elétron se colidisse com o núcleo. Em 1913, Neils Bohr[26] na tentativa de corrigir o modelo de Rutherford e propor seu modelo, que estava de acordo com algumas experiências, desenvolveu 4 postulados [27] que são:

1. *Um elétron em um átomo se move em uma órbita circular em torno do núcleo sob influência da atração colombiana entre o elétron e o núcleo, obedecendo às leis*

da mecânica clássica.

2. Em vez da infinidade de órbitas que seriam possíveis segundo a mecânica clássica, um elétron só pode se mover em uma órbita na qual seu momento angular orbital L é um múltiplo inteiro de \hbar (a constante de Planck dividida por 2π).

3. Apesar de estar constantemente acelerado, um elétron que se move em uma dessas órbitas possíveis não emite radiação eletromagnética. Portanto sua energia total E permanece constante.

4. É emitida radiação eletromagnética se um elétron, que se move inicialmente sobre uma órbita de energia total E_i , muda seu movimento descontinuadamente em forma a se mover em uma órbita de energia total E_f . A frequência da radiação emitida ν é igual à quantidade $(E_i - E_f)$ dividida pela constante de Planck h .

Os 3 primeiros postulados foram propostos por Bohr sem uma justificativa prévia, então a grande corrida da comunidade científica era para provar os seus postulados. O interessante desses postulados é que eles misturam a física clássica com a não clássica. Olhado pela visão clássica a estabilidade do elétron, de um átomo de Hidrogênio por exemplo, era devido a força colombiana, com a força centrípeta. Já que em seu primeiro postulado Bohr afirmou que o movimento era circular, portanto o elétron deve obedecer a força centrípeta.

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} = m \frac{v^2}{r}. \quad (2.1)$$

Aqui inicialmente vamos considerar a massa do elétron completamente desprezível comparada a massa do núcleo, e também que o núcleo permanece fixo no espaço.

Assumindo que a eq. 2.1 é válida classicamente, podemos assumir que os momentos angulares também vão se equivaler.

$$mvr = n\hbar. \quad (2.2)$$

Nesse momento específico já vemos a tentativa de unir uma física clássica com uma física quântica, ou seja, havia a tentativa de tratar um questão quântica classicamente.

Isolando v na eq. 2.2, substituindo na eq. 2.1 e resolvendo para o raio, temos

$$r = 4\pi\epsilon_0 \frac{n^2 \hbar^2}{me^2}. \quad (2.3)$$

Mais tarde o termo $4\pi\epsilon_0 \frac{\hbar^2}{me^2}$ ficou conhecido mundialmente como o raio de Bohr a_B levando a eq. 2.3 na forma

$$r = n^2 a_B. \quad (2.4)$$

Se calcularmos o valor do raio de Bohr chegamos a um resultado de $a_B = 0,529 \text{ \AA}$, como esse valor era próximo dos valores estipulados anteriormente para o átomo, com essa medida o modelo de Bohr ganhou força na comunidade.

Outros pontos importantes a se destacar eram em relação ao segundo e terceiros postulados. No modelo atômico de Bohr, para o átomo de Hidrogênio, as energias assumidas eram dadas por

$$E = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{2r}, \quad (2.5)$$

inserindo a eq. 2.5 na relação de Bohr chegamos à

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{2a_B}, \quad (2.6)$$

onde o termo $\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{2r}$ é conhecido como a Energia de Rydberg [28], tornando a eq. 2.6 na forma

$$E_n = -\frac{1}{n^2} E_R. \quad (2.7)$$

Com esses resultados, os postulados de Bohr ganharam um pouco mais de peso para serem levados como corretos. Lembrando que os resultados foram em cima do átomo de Hidrogênio [27].

podemos agora representar a eq. 2.7 na forma de um diagrama de níveis de energia para o átomo de Hidrogênio [29].

Vale destacar que o estado fundamental ($n=1$) o valor da energia calculada por 2.7 equivale a $-13,6 \text{ eV}$, o que estava de acordo com a energia de ligação observada empiricamente para o átomo de hidrogênio, confirmando ainda mais os postulados de Bohr.

As questões de absorção ou emissão de fotos quando um elétron muda sua orbita vai seguir esse diagrama de níveis obtidos pelo postulado de Bohr [30]. Podemos

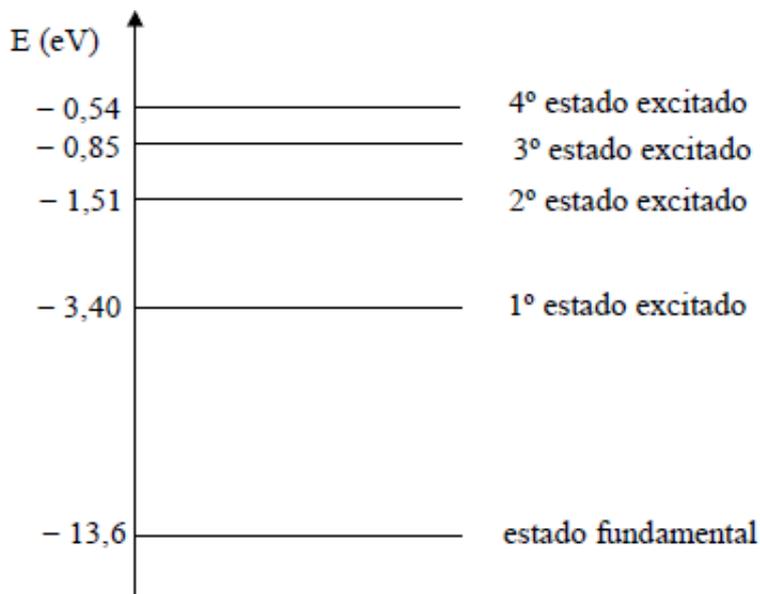


Figura 2: Diagrama de níveis de energia para o átomo de hidrogênio

então analisar os dois casos. Vamos inicialmente começar pelo caso de Absorção de Fótons.

Na absorção podemos calcular a energia do fóton, podemos fazer a diferença nas energia dos níveis em que ele se encontra

$$E = E_f - E_i, \quad (2.8)$$

$$E = -\frac{1}{n_f^2}E_R + \frac{1}{n_i^2}E_R, \quad (2.9)$$

$$E = E_R \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right). \quad (2.10)$$

A eq. 2.10 é mais um resultado muito semelhante a outro resultado encontrado por Rydberg e Balmer para linhas espectrais, o que mais uma vez, matematicamente fazia sentido com resultados observados anteriormente.

Assumindo que a energia pode ser vista como uma grandeza quântica, podemos substituir a energia pela relação dada por Planck

$$\frac{hc}{\lambda} = E_R \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right), \quad (2.11)$$

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{E_R}{hc} \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right), \quad (2.12)$$

se comparada com a relação de Balmer

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right). \quad (2.13)$$

Onde R_H é a chamada contante de Rydberg para o hidrogênio.

Se assumirmos que as equações 2.12 e 2.13 são equivalentes, então podemos dissertar sobre a contante de Rydberg, ou seja

$$R_H = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{me^4}{4\pi\hbar^3 c}. \quad (2.14)$$

Vale lembrar que a eq. 2.12 foi desenvolvida no caso da absorção fotônica, mas como o elétron não ficará por muito tempo excitado, vamos ver o caso da emissão de fóton, que segue basicamente a mesma ideia da absorção.

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{E_R}{hc} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right). \quad (2.15)$$

Em termos de comparação das equações de absorção e emissão, a diferença será na permutação de n_f com n_i de lugar. Já na questão do nível de energia podemos fazer algumas análises pela figura 3.

Pela figura podemos destacar que se o elétron salta de qualquer nível e acaba no nível fundamental $n=1$, é conhecido como série de Lyman, se terminam no nível $n = 2$, é conhecido como série de Balmer, e por fim, se terminar em $n = 3$, é conhecido como série de Paschen [31] [32].

Podemos destacar então, que Bohr teve sucesso em quantizar o átomo, ou seja, descrever o espectro do átomo de hidrogênio e com essa descrição foram descobertas os níveis ou camadas de energia n . Região em que o elétron podia assumir ao redor do núcleo. Determinou que o raio da órbita era $0,53 \text{ \AA}$, o que concordava com o valor previsto para o diâmetro do átomo próximo de $2,2 \text{ \AA}$. E não conseguiu explicar as linhas espectrais quando os átomos eram mais complexos.

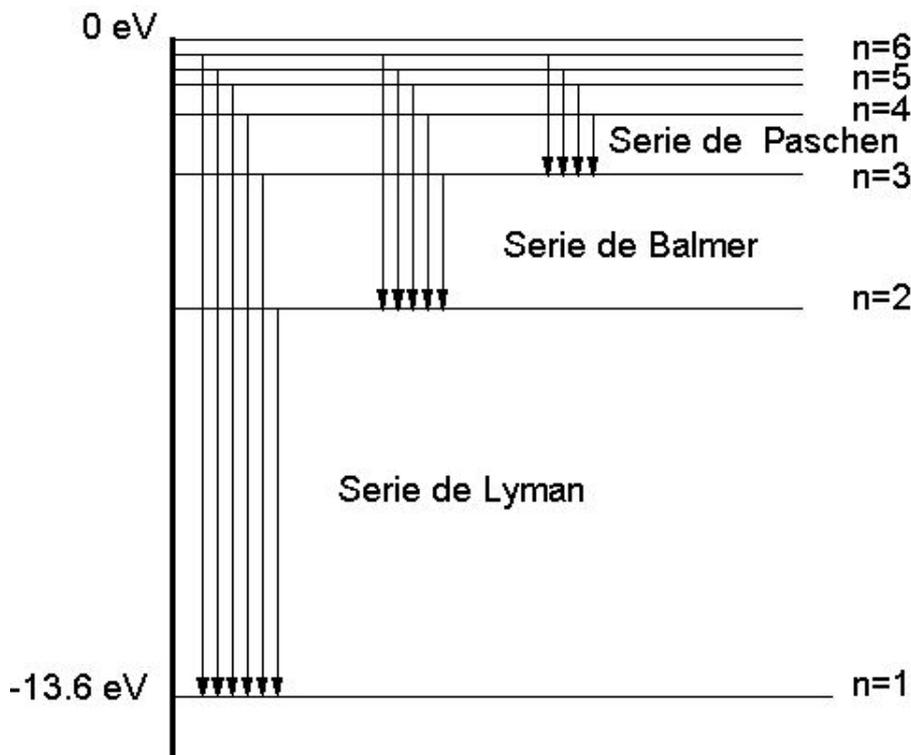


Figura 3: Diagrama de níveis de energia para emissão fotônica

2.2.5 Modelo de Sommerfeld

Com os avanços da espectroscopia, os aparelhos de medições tiveram uma tecnologia mais avançada e com uma melhor resolução das linhas espectrais. Com esse avanço, veio a surpresa em que uma linha era composta por um conjunto de linhas distintas muito próximas, o que originou o estudo da Estrutura Fina [33]. Além da quantização do átomo de Bohr, existiram outras quantizações, como a de energia de Plank em 1901, e a da carga do elétron por J.J. Thomson em 1897 e em 1909 por Millikan.

Embora todas as quantizações foram bem sucedidas, havia a necessidade de se criar uma regra geral para a quantização. Então, por volta de 1916, William Wilson e Arnold Sommerfeld, tentaram criar essa regra geral para a quantização [34].

A regra de quantização de Wilson-Sommerfeld, diz que a integral de linha em um caminho fechado no espaço de fase, é igual à um múltiplo inteiro da constante de Plank, onde o espaço de fase é formado pelas coordenadas generalizadas, e seus respectivos momentos conjugados, representado por

$$\oint p_q dq = n_q h, \quad (2.16)$$

onde q é uma das coordenadas, p_q é o momento associado a essa coordenada, n_q é um número quântico que toma apenas valores inteiros, e \oint significa que a integração é tomada sobre um período das coordenadas q .

O significado dessa regra pode ser aplicado por exemplo, para deduzir a quantização de Bohr para o momento angular. Utilizando a regra de Wilson-Sommerfeld [27], vamos tomar então a integral do momento angular num espaço de fase em relação a coordenada θ . De 2.16 temos

$$\oint p_q dq = n_q h,$$

$$\oint L d\theta = nh. \quad (2.17)$$

Como o momento angular L não depende de θ podemos tirá-lo da integral, o que nos restará somente a integral do ângulo.

$$L \oint d\theta = 2\pi L, \quad (2.18)$$

$$2\pi L = nh, \quad (2.19)$$

$$L = \frac{nh}{2\pi}, \quad (2.20)$$

ou

$$L = n\hbar. \quad (2.21)$$

que justamente é a lei de quantização de Bohr.

No modelo de Sommerfeld, é aplicado as regras de quantização de Wilson-Sommerfeld no átomo de hidrogênio, para o qual se supõe que o elétron possa se mover em órbitas elípticas. Visto que era uma tentativa de se explicar a estrutura fina espectro de hidrogênio.

Sommerfeld então tentou calcular o tamanho e a forma das possíveis órbitas elípticas usando a regra de quantização, para cada coordenada generalizada r e θ .

$$\oint L d\theta = n_\theta h,$$

$$\oint p_r dr = n_r h,$$

O resultado da primeira é o mesmo para o momento angular orbital

$$L = n_{\theta} \hbar; \quad n_{\theta} = 1, 2, 3, \dots$$

Já pela segunda condição temos

$$L \left(\frac{a}{b} - 1 \right) = n_r \hbar. \quad n_r = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Onde existe a relação de L com a/b, que é a razão entre o semi-eixo maior e o semi-eixo menor da elipse.

Aplicando a visão clássica para estabilidade proposta na eq. 2.1, vamos obter uma nova equação. Com isso foi possível Sommerfeld calcular os semi-eixos maior e menor a e b, que darão as formas e os tamanhos das órbitas elípticas, além de fornecer também a energia E de um elétron nessa órbita. Os resultados são

$$a = \frac{4\pi\epsilon_0 n^2 \hbar^2}{\mu e^2}, \quad (2.22)$$

$$b = a \frac{n_{\theta}}{n}, \quad (2.23)$$

$$E = - \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{\mu e^4}{2n^2 \hbar^2}, \quad (2.24)$$

onde μ é a massa reduzida do elétron, e onde o número quântico n é definido por

$$n = n_{\theta} + n_r. \quad (2.25)$$

Como $n_{\theta} = 1, 2, 3, \dots$ e $n_r = 0, 1, 2, 3, \dots$, n pode tomar os valores

$$n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.26)$$

Para um dado valor de n, n_{θ} pode tomar apenas os valores

$$n_{\theta} = 1, 2, 3, \dots, n \quad (2.27)$$

onde o número inteiro n é chamado *número quântico principal*, e n_{θ} é chamado *número quântico azimutal*. Vale destacar que em alguns livros o *número quântico azimutal* é definido por l.

Podemos destacar então que a eq.2.24 nos fornece que a forma da órbita é

determinada pela razão entre n_θ e n . Se n_θ for igual a n a órbita será um círculo de raio a , que neste caso seria similar a eq. 2.3, a equação que fornece os raios das órbitas de Bohr.

A figura 4 representa, as órbitas correspondentes aos três primeiros valores do número quântico principal. Pela figura podemos ver também que, cada nível de energia n está dividido em n subníveis, correspondentes a uma órbita circular e a $n - 1$ órbitas elípticas de diferentes excentricidades. O núcleo atômico ocupa um dos focos da elipse e as órbitas elípticas foram chamadas de subníveis ou subcamadas.

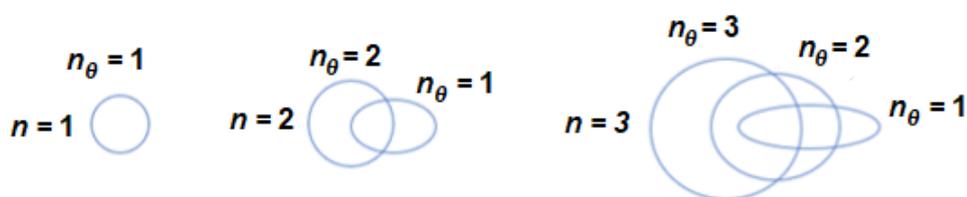


Figura 4: Órbitas elípticas de Bohr-Sommerfeld para os três primeiros valores do número quântico principal n .

Portanto, é com o modelo de Sommerfeld que damos um final para esse capítulo, que foi um breve resumo da teoria do atomismo e dos modelos atômicos, até Sommerfeld. Obviamente os modelos atômicos não param por aqui, mas pela proposta do trabalho não há necessidade de ir mais longe. A ideia era que esse capítulo não ficasse muito extenso, mas no fundo acabou dando um panorama básico dos modelos e do qual foi o impulso para se ter uma resposta de onde até poderíamos ir nas escalas mesoscópicas.

3 *Conceitos Fundamentais*

Neste capítulo, serão apresentados os conceitos fundamentais que irão englobar, a Teoria cinética dos gases, o livre caminho médio e o movimento Browniano. Conceitos que serão fundamentais para construirmos um modelo de condução elétrica baseado no modelo de Drude. Por fim, vamos abordar as diferentes distribuições estatísticas como o objetivo de já dar um norte do comportamento dos elétrons nos condutores.

3.1 A Teoria Cinética dos Gases

A Teoria Cinética dos Gases [35], veio como uma tentativa de explicar o nosso mundo visível e imaginável, o mundo macroscópico, a partir de uma visão microscópica e até então obscura, o embate dos que acreditavam no mundo construído por átomos com os que não acreditavam era muito grande e perdurou por décadas. Muitos químicos e físicos se digladiavam em congressos tentando defender seu ponto de vista. dando início por Dalton, como já mostramos anteriormente, seguindo de nomes como Perin e etc e, o fio da disputa estava apontando a favor dos que não acreditavam. Havia mais sentido e mais “provas” que o mundo atômico era ficção e simplesmente uma teoria. Parte dessa justificativa em não aceitar o átomo estava ligada ao fato de que era impossível ser feita a observação direta ou indireta por não haver tecnologia na época.

A Teoria Cinética dos Gases parte do princípio de que os gases são formados por átomos e moléculas que estão se movimentando de forma contínua. Logo ela se baseia na hipótese atômica, ou seja, todas as suas conclusões terão suporte na teoria atômica. Vale observar que se for obtido resultados verificáveis experimentalmente é a Teoria Cinética dos Gases que dará suporte a teoria atômica. Vamos partir das seguintes suposições:

- O gás é constituído por um número grande N de moléculas idênticas, separadas por uma distância muito maior do que seu diâmetro;

- As moléculas colidem elasticamente umas com as outras e com as paredes do recipiente e não interagem à distância, isto é, não exercem nenhuma força a não ser no momento das colisões;

- Na ausência de forças externas (a gravidade pode ser desprezada), não existe nenhuma posição privilegiada para as moléculas no interior do recipiente e não existe nenhuma direção privilegiada para o vetor velocidade.

Partindo dessas suposições, temos que a Teoria Cinética dos Gases já era conhecida pelos físicos e químicos desde o sec XVIII, a equação que sintetiza a teoria é a equação de Clapeyron [36]:

$$pV = nRT, \quad (3.1)$$

onde a constante R é a constante dos gases e tem valor dos gases e tem valor $R = 8,31 \text{ J/mol.K}$

Podemos relacionar o número de mols n com o número de moléculas, assim segue:

$$n = \frac{N}{N_A}, \quad (3.2)$$

onde N_A é o número de Avogadro.

Vale destacar que no final do sec XIX o valor do número de Avogadro não era medido como precisão, essa medida incorreta tornou a hipótese atômica desacreditada [15].

Podemos agora escrever a equação 1 em termos de:

$$pV = NkT, \quad (3.3)$$

onde

$$k = \frac{nR}{N} = \frac{R}{N_A}.$$

Como a constante R só envolve valores macroscópicos fica fácil de obter seu valor, portanto se na equação 4 encontrarmos o valor de k , indiretamente encontramos o valor de N_A . Podemos destacar também que a constante k é a constante de Boltzmann [37].

O objetivo dessa parte é mostrar a maneira de deduzir a equação 1 através da

hipótese atômica. Segue então [35]:

Vamos considerar um recipiente cilíndrico com comprimento L e base com área A , nele está encerrado uma massa de gás em continuo movimento, seguindo a hipótese atômica. Considere o eixo x no sentido do comprimento L . A ideia inicial é encontrar a força que uma molécula faz durante o choque com a parede.

Tomando a iésima molécula do gás com massa m e tendo em vista que essa molécula está em movimento aleatório e tem velocidade v , considere que durante o choque com as paredes do recipiente o módulo velocidade da molécula se mantém constante e somente sua trajetória se altera. Além disso a densidade do gás é baixa a ponto de que nenhuma molécula interage com outra.

Decompondo sua velocidade no eixo x temos a velocidade v_{xi} , e sabemos que depois do choque a molécula irá sofrer uma reflexão com a parede devido a colisão ser elástica. Portanto, a molécula tem momento $+mv_{xi}$ quando sofre a colisão, reflete com momento $-mv_{xi}$.

Temos então que a molécula sofre uma variação de momento de $\Delta = -2mv_{xi}$, pois, $p_{xi0} = mv_{xi}$ e $p_{xi} = -mv_{xi}$

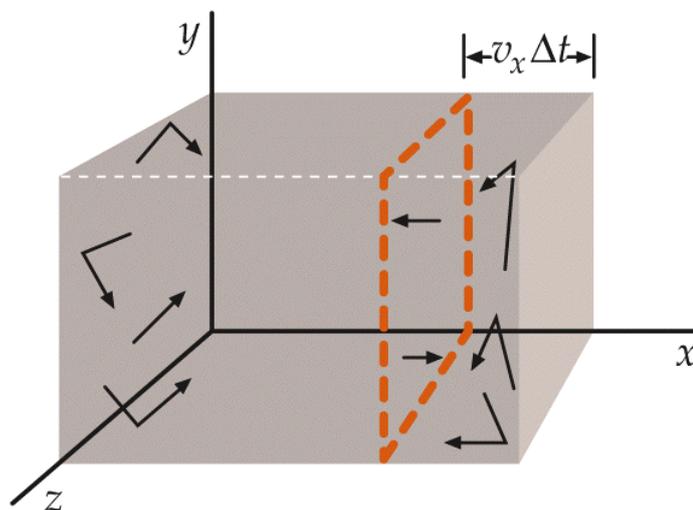


Figura 5: Moléculas de gás em recipiente cilíndrico.

Para dar continuidade no objetivo inicial de encontra a força, devemos determinar o tempo que a molécula leva para dar duas colisões sucessivas nas paredes da direita e esquerda. Lembrando que o módulo da velocidade não se altera devido a colisão ser elástica, e a distância da componente x é o próprio comprimento L do cilindro.

Como a velocidade é constante podemos recorrer as equações da Cinemática,

então para determinar o tempo temos:

$$\Delta t_i = \frac{2L}{v_{xi}}$$

Dividindo a variação de momento pela variação de tempo, determinamos a força média que a parede realiza na partícula, essa força tem o sentido contrário o de x , mas pela 3ª Lei de Newton a força que a parede realiza na molécula é a mesma, mas com sentido oposto a a força que a molécula faz na parede. Então:

$$F_i = \frac{\Delta p_{xi}}{\Delta t_i} = \frac{mv_{xi}^2}{L}. \quad (3.4)$$

Essa é a força média que uma molécula realiza sobre a parede do lado direito. Lembrando que estamos calculando o módulo da força.

A força total então sobre as paredes nada mais é do que as soma das forças sobre todas as moléculas:

$$F = \sum_{i=1}^N \frac{mv_{xi}^2}{L}. \quad (3.5)$$

A primeira parte do objetivo foi concluída, o interessante agora é encontrar a pressão feita pelo gás sobre a parede da direita. Para calcular basta dividir a força encontrada pela área o cilindro.

$$p = \frac{F}{A} = \frac{m}{AL} \sum_{i=1}^N v_{xi}^2. \quad (3.6)$$

O termo AL pode ser substituído pelo volume do recipiente transformando a equação 3.6 para:

$$p = \frac{F}{A} = \frac{m}{V} \sum_{i=1}^N v_{xi}^2, \quad (3.7)$$

$$pV = Nm \frac{\sum v_{xi}^2}{N}. \quad (3.8)$$

Observe que a equação 3.7 foi multiplicada e dividida por N com o objetivo de provar a equação de gases perfeitos 3.3 pois, a equação possui um N .

Observando a equação 3.8 notamos que o termo $\sum v_{xi}^2/N$ é a média do quadrado das componentes x das velocidades das partículas. Feita essa observação, podemos mudar a notação para $\langle v_x^2 \rangle$. E a equação 3.8 se transforma em:

$$pV = Nm \langle v_x^2 \rangle. \quad (3.9)$$

Como as partículas estão em contínuo movimento, não existe uma direção privilegiada para o movimento das moléculas portanto, $\langle v_x^2 \rangle$ deve ser igual a $\langle v_y^2 \rangle$ e a $\langle v_z^2 \rangle$, ou seja, por simetria:

$$\langle v_x^2 \rangle = \langle v_y^2 \rangle = \langle v_z^2 \rangle .$$

Tomando o quadrado da velocidade temos que

$$\langle v^2 \rangle = \langle v_x^2 \rangle + \langle v_y^2 \rangle + \langle v_z^2 \rangle .$$

Assim temos:

$$\langle v^2 \rangle = \langle v_x^2 \rangle + \langle v_y^2 \rangle + \langle v_z^2 \rangle ;$$

$$\langle v^2 \rangle = \langle v_x^2 \rangle + \langle v_x^2 \rangle + \langle v_x^2 \rangle ;$$

$$\langle v^2 \rangle = 3 \langle v_x^2 \rangle . \quad (3.10)$$

Substituindo o valor da velocidade média na equação 3.9 temos

$$pV = \frac{1}{3}Nm \langle v_x^2 \rangle . \quad (3.11)$$

Comparando a equação 16 com a 3 podemos dizer que elas são idênticas se podermos relacionar os termos $m\langle v^2 \rangle/3$ com kT , fazendo isso temos o seguinte:

$$pV = \frac{1}{3}Nm \langle v_x^2 \rangle .$$

$$pV = NkT .$$

$$kT = \frac{1}{3}m \langle v_x^2 \rangle .$$

Multiplicando e dividindo o lado direito da equação por 2 temos

$$pV = \frac{2}{3} \frac{m \langle v_x^2 \rangle}{2} ,$$

onde o termo $(1/2)m\langle v_x^2 \rangle$ é o valor da energia cinética média $\langle K \rangle$:

$$\langle K \rangle = \frac{3}{2}kT . \quad (3.12)$$

Fazendo essa identificação, podemos observar 2 pontos importantes. O primeiro ponto é que nesse momento fazendo a comparação das equações 3.11 com a 3.3 ganhamos a interpretação microscópica do conceito de temperatura, ou seja, a

temperatura absoluta é uma medida da energia cinética das moléculas. Por outro lado, quando colocamos um termômetro para medir a temperatura de uma amostra gasosa, indiretamente estamos medindo a energia cinética média das moléculas do gás.

Outro ponto importante é que relacionando o termo do lado direito da equação 3.12 com o valor médio da energia cinética fica provado a equação de estado dos gases perfeitos.

Uma outra forma de se verificar a equação 3.12 é determinar o calor específico molar C_v de um gás monoatômico definido pela fórmula

$$C_v = \lim \frac{\Delta Q}{\Delta T}. \quad (3.13)$$

Onde ΔQ é a quantidade de calor fornecida a 1 mol da substância e ΔT é a variação de temperatura. Sabendo que a volume constante o Trabalho W exercido pelo gás é nulo portanto, pela 1ª lei da termodinâmica

$$\Delta U = Q - W, \quad (3.14)$$

se ($W = 0$)

$$\Delta U = Q. \quad (3.15)$$

Portanto, o calor fornecido é igual a energia interna U do sistema. O que implica em

$$C_v = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_v. \quad (3.16)$$

Supondo que a energia interna total é igual a energia cinética de translação, temos da equação 3.12 que:

$$\begin{aligned} \langle K \rangle &= \frac{3}{2}kT; \\ \langle K \rangle &= \left(\frac{3}{2} \right) \left(\frac{R}{N_A} \right) T; \\ \left(\frac{3}{2} \right) RT &= N_A \langle K \rangle = U; \\ C_v &= \frac{\partial \left(\frac{3}{2}RT \right)}{\partial T}; \\ C_v &= \frac{3}{2}R = 2,98 \text{ cal/mol}. \end{aligned} \quad (3.17)$$

O valor encontrado é bem próximo de medidas feitas em gases monoatômico como

o Argônio e o Hélio. Essa conclusão foi bastante importante para corroborar o estudo da física estatística na época.

Da equação 3.12 podemos também estimar a velocidade das moléculas de um gás. Mesmo não conhecendo a distribuição das velocidades podemos calcular a média do quadrado da velocidade e a velocidade média quadrática. Temos que:

$$kT = \left(\frac{3}{2}\right) m \langle v^2 \rangle;$$

$$\langle v^2 \rangle = \frac{3kT}{m};$$

$$V_{rms} = \left(\frac{3kT}{m}\right)^{\frac{1}{2}}. \quad (3.18)$$

Comparando a equação 3.18 com a equação da velocidade do som em um gás dado por

$$V_{som} = \left(\frac{\gamma RT}{m}\right)^{\frac{1}{2}}. \quad (3.19)$$

Portanto, podemos dizer que a velocidade média quadrada das moléculas de um gás é da mesma ordem de grandeza que a velocidade do som no gás.

3.2 O Livre Caminho Médio

Imagine agora uma situação onde a diluição da amostra gasosa não seja tão grande, nesse caso como as moléculas estão em contínuo movimento é esperado que elas estejam em constantes colisões umas com as outras, e conseqüentemente a velocidade média que podemos determinar é muito baixa, chamada de velocidade de deriva.

Analisando o movimento de uma molécula temos o seguinte:

A molécula em determinado instante se colide com outra molécula, muda sua direção, percorre um espaço, se colide novamente e muda mais uma vez sua direção. Vale lembrar que por considerarmos um choque elástico o módulo de sua velocidade não varia.

O que vamos chamar de livre caminho médio é a distância média percorrida pela molécula entre duas sucessivas colisões [38].

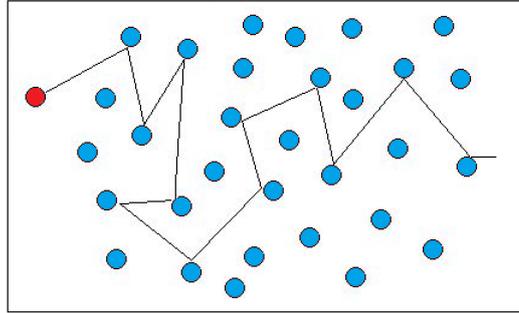


Figura 6: Moléculas de gás se deslocando.

Para isso, vamos considerar que uma molécula é uma esfera de raio R se deslocando entre as moléculas. Quando a molécula se desloca ela cria em torno dela um “volume” na forma de um cilindro que é o seu caminho, esse cilindro tem uma área da base com o diâmetro de $2R$, ou seja, se a distância entre dois centros de duas moléculas for menor que o diâmetro da área irá haver um choque.

Vamos chamar essa área perpendicular ao movimento do cilindro imaginário de seção de choque, que é a área formada que forma o volume para não haver choque. Se outro centro de molécula estiver dentro desse volume haverá o choque entre as duas.

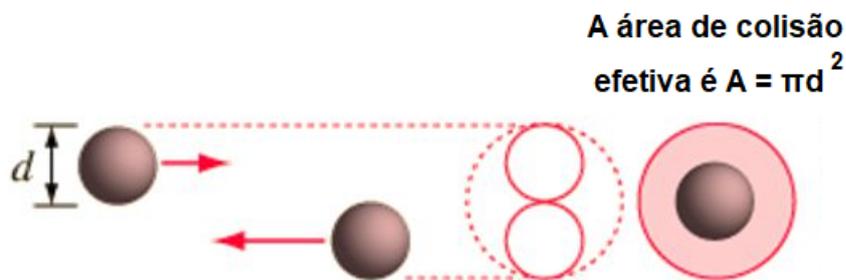


Figura 7: Representação de uma molécula com diâmetro $2d$ e sua área de colisão efetiva.

Temos que a distância percorrida pela partícula até o choque segue:

$$\Delta S = v\Delta t. \quad (3.20)$$

O volume imaginário do cilindro é a área da base vezes a altura, que no caso é a

distância percorrida, ou seja:

$$V = v\Delta t\pi d^2. \quad (3.21)$$

Se fizermos uma identificação de n como o número de moléculas por volume $n = (N/V)$ temos que a concentração de moléculas dentro do volume imaginário é $n v\Delta t\pi d^2$. no tempo em que a molécula se move. Portanto:

$$N = nv\Delta t\pi d^2. \quad (3.22)$$

Para determinar o número de colisões por segundo basta calcular a taxa de colisões por segundo simplesmente passando o Δt para o lado esquerdo da equação anterior.

$$\frac{N}{\Delta t} = nv\pi d^2. \quad (3.23)$$

Ou seja, é o número de moléculas por unidade de tempo. O próximo passo é determinar o tempo gasto entre duas colisões consecutivas, definindo para esse tempo temos:

$$T = \frac{1}{nv\pi d^2}. \quad (3.24)$$

Esse então é o tempo médio entre duas colisões consecutivas. Para definir livre caminho médio temos:

$$\lambda = vT; \quad (3.25)$$

$$\lambda = v \frac{1}{nv\pi d^2};$$

$$\lambda = \frac{1}{n\pi d^2}. \quad (3.26)$$

Esse resultado encontrado é apenas uma aproximação do livre caminho médio, visto que foi levado em conta que só uma molécula se move enquanto as demais permanecem em repouso, quando na verdade isso não ocorre, em um gás todas as moléculas estão em constante movimento como foi definido anteriormente.

Para fazer a correção um fator de $\sqrt{2}$ deve ser adicionado, fazendo que a equação leve em conta todos os movimentos.

$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{2}n\pi d^2}; \quad (3.27)$$

O resultado encontrado então é a equação geral para o livre caminho médio, onde se considera que todas as partículas estão em contínuo movimento.

3.3 Movimento Browniano

O movimento Browniano [39], é conhecido atualmente como o movimento aleatório de uma partícula dentro de um fluido, entretanto essa partícula deve possuir duas características. Ela deve ser suficientemente grande para ser observada por um microscópio e sua massa deve ser suficientemente pequena para que a colisão de uma molécula com ela provoque um desvio em seu movimento, ou seja, são objetos de tamanho microscópicos que tem massa suficientemente pequena para sofrer uma mudança no seu movimento graças ao impacto de uma molécula.

Em 1827 o botânico escocês Robert Brown foi o primeiro a publicar uma abordagem científica para esse movimento o qual conseqüentemente acabou herdando seu nome. Vale destacar que Robert Brown não foi a primeira pessoa a observar tal evento, historicamente a primeira evidencia de que já se tinha conhecimento de tal movimento, vem do romano Tito Lucrécio em seu poema *De rerum natura* (Sobre a Natureza das coisas) [40], nesse poema já havia menções sobre partículas ainda menores, se referindo ao que nós hoje chamamos de átomo, e mencionando também o movimento (movimento browniano) que poderia ser uma prova da existência das partículas ainda menores.

Em 1785 o fisiologista, biólogo e químico neerlandês Jan Ingenhousz [41], demonstrou o movimento irregular de partículas de carvão na superfície de álcool, o que lhe dá a reivindicação da descoberta do fenômeno que ficou conhecido por movimento browniano, mas como não houve publicação de sua descoberta o crédito acabou ficando com Robert Brown.

Portanto, o movimento browniano é uma espécie de janela para observar (indiretamente, através dos seus efeitos) o movimento molecular invisível ao microscópio. A figura 8 representa uma trajetória browniana típica entre dois pontos A e B durante um tempo de observação macroscópico.

Historicamente, Brown conseguiu observar e registrar o movimentos das partículas se movendo aleatoriamente, mas não conseguiu criar um modelo matemático que fosse possível descrevê-lo. Só Albert Einstein em 1905, conseguiu descrever o fenômeno de forma matemática correta. Além disso conseguiu demonstrar a existência de átomos no mesmo trabalho publicado, inclusive conseguiu também determinar o Número de Avogadro [42][43].

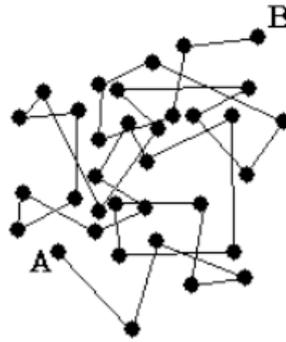


Figura 8: A figura abaixo representa uma trajetória browniana típica entre dois pontos A e B durante um tempo de observação macroscópico.

3.3.1 A relação de Einstein

Para Einstein o processo de difusão do movimento browniano era devido ao espalhamento das partículas quando elas sofriam colisão com as outras moléculas do meio. Vamos considerar l a distância média percorrida por uma partícula entre duas colisões e τ o tempo médio entre duas colisões. Vamos considerar também que há um campo de força externo que provoca na partícula uma força f_p entre duas colisões, o que conseqüentemente irá sofrer uma aceleração dada por:

$$a = \frac{f_p}{m}. \quad (3.28)$$

No intervalo de tempo entre duas colisões a velocidade de arrasto da partícula varia de forma acelerada, passando de $v(0) = 0$ para $v(\tau) = a\tau = (f_p/m) \cdot \tau = v_{max}$.

Temos que a velocidade média da partícula é dada por:

$$V = \frac{v_{max} - v_0}{2} = \frac{f_p \tau}{2m}. \quad (3.29)$$

Sua mobilidade média é:

$$\mu_p = \frac{v}{f_p} = \frac{\tau}{2m}. \quad (3.30)$$

Por outro lado, como visto anteriormente, podemos relacionar a energia cinética média de uma partícula em movimento unidimensional com a temperatura por:

$$\frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}kT, \quad (3.31)$$

onde k é a constante de Boltzman ($k = 1,381 \times 10^{-23}$ J/K), e T é a temperatura absoluta.

Vamos supor agora que a velocidade média é $v = l/\tau$, com essa suposição a

equação 3.31 torna – se:

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}m\left(\frac{l}{\tau}\right)^2 &= \frac{1}{2}kT; \\ \left(\frac{2m}{\tau}\right)\left(\frac{l^2}{2\tau}\right) &= kT.\end{aligned}\quad (3.32)$$

Substituindo a equação 3.30 nessa equação e considerando que o coeficiente de difusão é dado por $D = l^2/2\tau$, obtemos uma equação para o coeficiente de difusão em termos da mobilidade da partícula dada por:

$$D = \mu_p kT. \quad (3.33)$$

Que é chamada de relação de Einstein.

Podemos também escrever a relação de Einstein de outra forma, em termos do coeficiente da viscosidade do meio η . A Lei de Stokes afirma que a força necessária para mover uma partícula esférica de raio r por um fluido com viscosidade η e com velocidade v_p é dada por:

$$f_p = 6\pi r\eta v_p. \quad (3.34)$$

Então, usando a definição de mobilidade de uma partícula $\mu_p = (1/6)\pi r\eta$, substituindo em 3.33 temos:

$$D = \frac{kT}{6\pi r\eta}. \quad (3.35)$$

Essa equação é a chamada relação de Stokes – Einstein.

Uma consequência importante da relação de Stokes – Einstein é a possibilidade de se determinar o número de Avogadro. Para resumir essa parte vamos omitir alguns passos e vamos fazer algumas suposições. Para dar início podemos escrever que o coeficiente de difusão, em uma direção é dado por :

$$D = \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} = \frac{\partial n}{\partial t}, \quad (3.36)$$

onde $n(x, t)$ é o número de partículas por unidade de volume ao redor do ponto x no instante t .

Vamos supor que no tempo $t = 0$ todas as partículas estejam na origem, uma possível solução para a equação 3.36 é da forma:

$$n(x, t) = \frac{n}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp \frac{-x^2}{4Dt}, \quad (3.37)$$

onde $n = \int n(x)dx$ é o número total de partículas contidas no volume. Então o desvio quadrático médio $\langle x^2 \rangle$ da origem é dado por:

$$\langle x^2 \rangle = \frac{1}{n} \int x^2 n(x,t) dx = 2Dt. \quad (3.38)$$

Juntando agora a equação 3.38 com a 3.35 temos

$$\langle x^2 \rangle = \frac{k_B T}{3\pi\eta a}. \quad (3.39)$$

Se $k_B = R/N_A$ podemos escrever que:

$$N_A = \frac{RT}{3\pi\eta \langle x^2 \rangle a}. \quad (3.40)$$

A equação 3.40, relaciona o número de Avogadro com o desvio quadrático médio e o raio da partícula. Como $\langle x^2 \rangle$, t , a e n são mensuráveis consequentemente o número de Avogadro também é, como já tínhamos afirmado anteriormente.

O papel principal dessa equação, foi o elemento que faltava para a consagração da hipótese atômica, quando Einstein exhibe a equação para o cálculo do desvio quadrático médio do movimento Browniano e quando o francês Jean Perrin alguns anos depois faz a experiência, ele obtém com precisão o número de Avogadro pela primeira vez o que é suficiente para que a hipótese atômica fosse verdadeira.

3.4 Modelo de Drude

Quando o assunto é a matéria condensada vemos que os metais assumem um papel importante no assunto. Visto que os metais são bons condutores de eletricidade e calor, surge um interesse em explicar suas propriedades, o que marca o início então ao estudo da física do estado sólido.

Por volta de 1900, o físico alemão Paul Drude [44] atribuía condução elétrica e térmica devido a ideia de que os metais são formados por elétrons livres e íons positivos fixos (formando uma rede cristalina).

Drude teve como influência o descobrimento do elétron em 1897 feito por Thomson que abriu as portas para uma nova visão da estrutura da matéria, permitindo se compreender que a condução nos materiais poderia ser devido ao movimento dessa nova partícula descoberta.

Drude desenvolveu sua teoria sobre a condução elétrica e térmica nos metais, aplicando a teoria cinética dos gases ao metal. Na parte anterior desse texto, citamos que a teoria cinética dos gases foi um bom modelo para se fazer um paralelo entre o mundo microscópico e macroscópico.

Drude imagina que durante a formação do metal, alguns elétrons que estão fracamente ligados se desprendem do átomo e passam a se mover livremente. Já os íons que estão fortemente ligados acabam formando uma rede cristalina e no meio dessa rede os elétrons que se desprenderam podem se movimentar através dessa rede.

Portanto, o metal é visto basicamente como uma estrutura tridimensional regular de átomos com um grande número de elétrons livres que podem se movimentar por todo o volume da estrutura, análoga a um gás. O que acabou sendo denominado de gás de elétrons.

De acordo com [45], podemos analisar um análogo mecânico a essa ideia de Drude para o movimento do gás de elétrons dentro do metal.

Quando um elétron se movimenta dentro de um condutor, ele encontra em sua trajetória vários obstáculos, esses obstáculos acabam sendo os íons (átomos) que proporcionarão uma resistência ao movimento, que nós hoje conhecemos como resistência elétrica. Já o movimento dos elétrons pode ser devido a um campo elétrico existente.

Podemos esboçar nesse ponto um modelo macroscópico mecânico da situação. Para isso tomemos uma tábua na horizontal, nessa tábua existem pregos fixos de forma regular a princípio. Além dos pregos existem também, pequenas esferas entre os pregos por toda a tábua. Se por acaso a tábua sofrer uma pequena inclinação as esferas que estavam em repouso começarão a se movimentar, buscando a parte mais baixa da tábua.

Está claro que os elétrons são as esferas, os pregos são os íons e a inclinação que cria uma diferença de potencial gravitacional simula o campo elétrico, assim como a figura 9 nos mostra.

Esquema mostrando o sistema experimental que permite fazer um análogo mecânico para a condutividade dos metais.

Quando é criada uma diferença de potencial gravitacional na tábua as esferas passam a se mover e acabam sofrendo colisões com os pregos e com as próprias

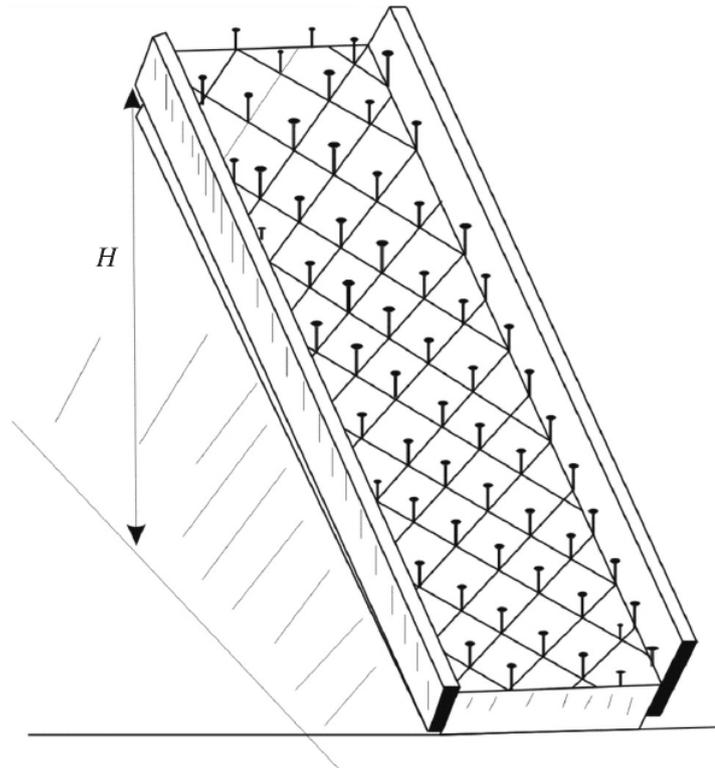


Figura 9: Esquema mostrando o sistema experimental que permite fazer um análogo mecânico para a condutividade dos metais..

esferas (nesse caso vamos ignorar as colisões entre as esferas), sendo aceleradas logo em seguida depois de cada colisão.

Portanto, quando a tábua sofre uma inclinação é criada uma diferença de potencial gravitacional que simula o campo elétrico externo, e esse potencial é o responsável pelo início do movimento das esferas ao longo da tábua. As esferas que simulam os elétrons livres, conseqüentemente acabam, durante seu movimento, se chocando com os pregos que simulam os íons do metal. Esses pregos que são obstáculos para o movimento das esferas criam uma resistência ao movimento das esferas, que nós podemos interpretar como a própria resistência elétrica. Lembrando que nesse ponto estamos ignorando as colisões entre as esferas.

Esse análogo não foi proposto por Drude obviamente, mas para termos de comparação é um bom modelo análogo mecânico macroscópico para a compreensão da condução elétrica nos metais.

Feito isso podemos agora dar início de fato ao modelo de Drude. Seu modelo tem como objetivo solucionar o problema do transporte eletrônico nos metais como já foi mencionado anteriormente, e ele foi baseado na estatística clássica de distribuição de velocidades de Maxwell Boltzmann.

Utilizando essa distribuição de velocidades podemos considerar que as partículas são distinguíveis, ou seja, podemos diferenciar um elétron de outro, então nesse caso Drude trata os elétrons como partículas distinguíveis que atende a estatística de distribuição de velocidades de Maxwell Boltzmann.

Além de levar em conta a estatística de Maxwell Boltzmann, devemos fazer algumas considerações básicas em que o modelo se fundamenta [46], que são as seguintes:

"1. Entre uma colisão e outra, as forças de interação elétron-elétron e elétron-íon são desprezíveis: todos os cálculos desenvolvem-se como se os elétrons de condução pudessem se mover livremente para qualquer parte no interior do metal. A energia total é cinética; a energia potencial é desprezada. A omissão da interação elétron-elétron entre as colisões é denominada aproximação do elétron independente. A correspondente omissão da interação elétron-íon é conhecida como aproximação do elétron livre. Atualmente é possível afirmar que a aproximação do elétron independente é, em muitos contextos, surpreendentemente boa. Enquanto que a aproximação do elétron livre apresenta-se inadequada até para poder obter uma compreensão qualitativa de muitas propriedades metálicas.

2. As colisões das partículas do gás são consideradas eventos instantâneos que abruptamente alteram a velocidade dos elétrons. Mas, ao contrário do gás ideal na teoria cinética, omitem-se as colisões entre as partículas do gás: somente são consideradas as colisões dos elétrons com os íons da rede cristalina. Na verdade, a imagem clássica dos elétrons ricocheteando de um íon para outro está longe da realidade. Afortunadamente, para uma compreensão qualitativa, e muitas vezes quantitativa, do fenômeno da condução metálica só se faz necessário levar em consideração que existe um mecanismo de espalhamento das partículas.

3. O elétron colide aleatoriamente contra um íon em um dado instante, tendo em média viajado livremente durante um tempo τ , desde sua última colisão, e viajaram em média livremente durante um tempo τ , até sua próxima colisão. O tempo é denominado tempo de relaxação, tempo livre médio entre colisões, ou ainda, tempo médio de espalhamento. τ é considerado independentemente da posição e da velocidade do elétron.

4. O equilíbrio térmico do sistema é mantido através das colisões de elétrons com a rede de íons: este é o único mecanismo possível quando admitidas as aproximações do elétron independente e do elétron livre. O equilíbrio é mantido da seguinte forma:

imediatamente após cada colisão, o elétron movimentar-se em direção aleatória com uma velocidade que não tem relação nenhuma com a velocidade antes do choque, mas o módulo é apropriado à temperatura do lugar onde ocorreu a colisão. Quanto mais alta for a temperatura do lugar onde se dá a colisão, mais rapidamente se movimentará o elétron após o choque."

Com base nessas considerações podemos tomar o momento linear da seguinte maneira:

$$\bar{p}(t + dt) = \begin{cases} \bar{p}_{col} & \text{se houver colisão,} \\ \bar{p}(t) + \bar{F}dt & \text{se não houver colisão} \end{cases} \quad (3.41)$$

Ou seja, se houver colisão, o momento linear depois da colisão será diferente do momento linear antes da colisão. E se não houver colisão quer dizer que o elétron seguiu sem interagir com a rede, e vai manter seu momento linear com um acréscimo de uma força externa.

Com isso sabemos a probabilidade de cada um desses eventos ocorrer, temos então que:

$$\bar{p}(t + dt) = \frac{dt}{\tau} \bar{p}_{col} + \left(1 - \frac{dt}{\tau}\right) (\bar{p}(t) + \bar{F}dt), \quad (3.42)$$

onde o termo (dt/τ) é a probabilidade de ter ocorrido uma colisão e o termo $(1 - dt/\tau)$ é a probabilidade de não ter ocorrido uma colisão.

Fazendo uma análise para vários elétrons temos que o termo p_{col} deve ser igual a zero, pois na média os elétrons se espalharam para todas as direções, então o momento linear depois da colisão será zero. O que nos leva então para:

$$\bar{p}(t + dt) = \left(1 - \frac{dt}{\tau}\right) (\bar{p}(t) + \bar{F}dt); \quad (3.43)$$

$$\bar{p}(t + dt) = \bar{p}(t) - \bar{p}(t) \frac{dt}{\tau} + \bar{F}dt + \frac{\bar{F}}{\tau} dt^2. \quad (3.44)$$

Eliminando os termos de segunda ordem temos:

$$\frac{\bar{p}(t + dt) - \bar{p}(t)}{dt} = \bar{F} - \frac{\bar{p}(t)}{\tau}. \quad (3.45)$$

E por fim rearranjando os termos chegamos na equação de movimento do modelo de Drude:

$$\frac{d\bar{p}}{dt} = \bar{F} - \frac{\bar{p}(t)}{\tau}. \quad (3.46)$$

Nessa equação temos que \bar{F} é a força externa que pode estar atribuída ao campo elétrico e magnético. E o segundo termo corresponde a uma força dissipativa, uma força proporcional a velocidade, ou seja, esse termo representa o papel da rede. Então nesse modelo simplificado de Drude a rede corresponde simplesmente a uma força dissipativa na condução dos elétrons.

Essa equação também nos permite deduzir a lei de Ohm de outra maneira. Para isso vamos resolver a equação com uma força externa no regime estacionário. Vamos considerar inicialmente que só há o campo elétrico, e esse campo é uniforme. Então na presença do campo elétrico uniforme temos:

$$\frac{d\bar{p}}{dt} = -e\bar{E} - \frac{\bar{p}(t)}{\tau}, \quad (3.47)$$

onde a o termo $-e\bar{E}$ assume o papel da força externa.

Aqui não estamos interessados na solução geral, mas sim na solução estacionária. Nessa solução não vamos ter mais a dependência do tempo. Para tempos muito longos o termo da esquerda da equação vai para zero. O que torna a equação da seguinte maneira:

$$\frac{\bar{p}(t)}{\tau} = -e\bar{E}. \quad (3.48)$$

Essa equação já é a Lei de Ohm, mas vamos escrevê-la de forma mais familiar. Primeiro temos que a densidade de corrente é da forma $\bar{j} = -nev$ e que o momento pode ser escrito da forma $p = mv$. Juntando essas duas equações e substituindo na solução estacionária temos:

$$\bar{j} = \frac{e^2 \tau n}{m} \bar{E}. \quad (3.49)$$

Esta equação me mostra que quando existe um campo elétrico uniforme e constante, é provocado no regime estacionário, uma corrente elétrica uniforme e constante que é paralela ao campo elétrico, o que basicamente descreve a lei de Ohm formulada na forma diferencial.

Um último passo que podemos dar para a última equação, é determinar que o termo $e^2 \tau n/m$ é a condutividade, que é uma constante de proporcionalidade tornado a equação:

$$\bar{j} = \sigma \bar{E}. \quad (3.50)$$

Portanto, o modelo de Drude nos permitiu reobter a Lei de Ohm como também permitiu obter em termos de grandezas microscópicas, o conceito de condutividade.

Em alguns casos específicos em vez de escrever a Lei de Ohm em termos da condutividade ela é escrita em termos da resistividade que é o inverso da condutividade.

$$\rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{m}{e^2 \tau n};$$

$$\bar{E} = \rho \bar{j}. \quad (3.51)$$

3.5 Distribuição de Maxwell - Boltzmann

Vimos anteriormente que um gás encerrado em um recipiente viaja em diferentes direções e velocidades, independente da temperatura interna do recipiente. Existem moléculas que se deslocam com velocidades altas, outras moléculas com velocidade média e outras com velocidades baixas a ponto de quase não se moverem.

Com isso surge a pergunta “qual é a velocidades de uma molécula de um gás? “. A pergunta pode ser absurda, mas a resposta pode ser mais absurda ainda, pois, uma molécula pode ter qualquer uma dentre diversas velocidades.

Uma alternativa a essa pergunta seria em vez de se determinar a velocidade de uma molécula, é mais conveniente descobrir qual a distribuição de velocidades em um gás a uma certa temperatura.

Foi essa questão que James Clerk Maxwell [47] e Ludwig Boltzmann [48], tentaram explicar. Imagine que temos dois recipientes, A e B isolados, cada um com a mesma qualidade de um gás confinado. O recipiente A está com a temperatura de 300 K e B está com 200K, em seu interior as moléculas estão se deslocando em diferentes direções e velocidades. Podemos também relacionar a temperatura com a energia cinética das moléculas do sistema, ou seja, a temperatura é proporcional a média da energia cinética das moléculas do sistema [49].

Como o recipiente A possui maior temperatura podemos dizer que a média da energia cinética de A é maior do que de B. Podemos notar também que a média das velocidades do sistema A será maior do que de B, visto que por consequência a média da energia é maior.

Com isso podemos desenhar uma distribuição das velocidades das moléculas que é a distribuição de Maxwell – Boltzmann de velocidades.

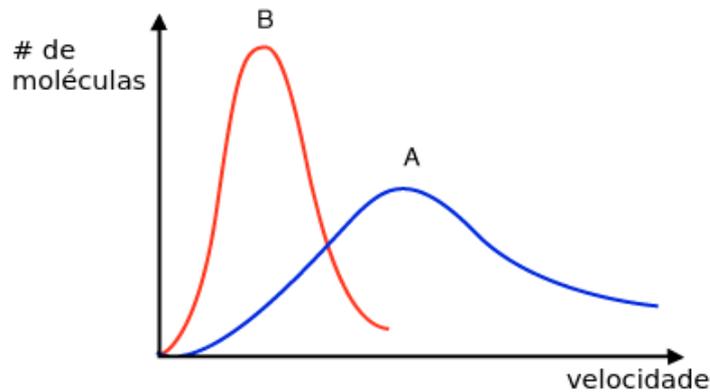


Figura 10: Gráfico da distribuição de velocidades de Maxwell - Boltzmann.

A primeira observação a ser feita, é que as áreas das curvas são idênticas, visto que inicialmente tínhamos a mesma quantidade de gás nos recipientes, outra observação é que o pico da curva do recipiente B é maior do que a de A, em outras palavras eu tenho um número maior de moléculas numa determinada velocidade, isso se dá ao fato de possuírem menos energia cinética, com menor velocidade se comparadas.

Em termos de cálculos, podemos começar com a distribuição de Boltzmann. Boltzmann propôs uma função de distribuição que permitia descrever a maneira como uma dada energia distribui-se ao longo de um número grande de partículas, em um dado sistema clássico em equilíbrio térmico com volume e número de partículas fixos e que passou a ser considerada como a função de distribuição mais importante da física estatística clássica.

Para determinar a Distribuição de Boltzmann, vamos inicialmente analisar um sistema que está dentro de um reservatório, levando em consideração que esse reservatório é muito maior do que o sistema que estamos analisando (Fig 11).

Levando em consideração que esse sistema possui uma energia definida, vamos encontrar a probabilidade de encontrar esse sistema dentro do reservatório. Para isso temos:

$$P(E) = \frac{\Omega_s(E) \cdot \Omega_{res}(E_{res})}{\Omega_T(E_T)} \quad (3.52)$$

Multiplicando os dois lados da eq. 3.52 por $k_b \ln$ temos:

$$k_b \ln P(E) = k_b \ln \left(\frac{\Omega_s(E) \cdot \Omega_{res}(E_{res})}{\Omega_T(E_T)} \right); \quad (3.53)$$



Figura 11: Distribuição de velocidades de Maxwell

$$k_b \ln P(E) = k_b \ln \left(\frac{\Omega_s(E) \cdot \Omega_{res}(E_{res})}{\Omega_T(E_T)} \right); \quad (3.54)$$

$$k_b \ln P(E) = k_b \ln[\Omega_s(E)] + \ln[\Omega_{res}(E_{res})] - \ln[\Omega_T(E_T)];$$

$$k_b \ln P(E) = S_s(E_s) + S_{res}(E_{res}) + S_T(E_T). \quad (3.55)$$

Se a Energia Total é a soma das Energias do reservatório e do Sistema, podemos escrever:

$$E_T = E_{res} + E_S \rightarrow E_{res} = E_T - E_S. \quad (3.56)$$

Usando e eq. 3.56 podemos reescrever a a entropia do reservatório na forma:

$$S_{res}(E_{res}) = S_{res}(E_T - E_S). \quad (3.57)$$

Assumindo que o reservatório é muito maior do que o sistema, ou seja, que $E_T \gg E_s$ podemos usar a série de Taylor para escrever a Entropia do reservatório na forma

$$S_{res}(E_{res}) \approx S_{res}(E_T) - \left| \frac{\partial S_{res}}{\partial E_S} \cdot E_S \right|; \quad (3.58)$$

Utilizando a regra da cadeia para o termo em módulo temos:

$$\frac{\partial}{\partial E_S} = \frac{\partial}{\partial E_{res}} \cdot \frac{\partial E_{res}}{\partial E_S} + \frac{\partial}{\partial E_T} \cdot \frac{\partial E_T}{\partial E_S}.$$

Aplicando a propriedade na eq. 3.58

$$S_{res}(E_{res}) = S_{res}(E_T) - \left| \frac{\partial S_{res}}{\partial E_{res}} \cdot E \right|; \quad (3.59)$$

Se

$$\frac{\partial S_{res}}{\partial E_{res}} = \frac{1}{T}. \quad (3.60)$$

Podemos reescrever a eq. 3.59 na forma

$$S_{res}(E_{res}) = S_{res}(E_T) - \frac{E}{T}; \quad (3.61)$$

Substituindo a eq. 3.61 na eq. 3.55 temos:

$$k_b \ln P(E) = S_s(E_s) + S_{res}(E_T) + S_T(E_T) - \frac{E}{T}. \quad (3.62)$$

Para isolar a probabilidade, vamos dividir os dois lados por k_b e tomar a exponencial, também dos dois lados.

$$P(E) = e^{S_{res}(E_T) + S_T(E_T)} \cdot e^{S_s(E_s)} \cdot e^{-\frac{E}{k_b T}}. \quad (3.63)$$

Da eq. 3.63, podemos destacar que o primeiro e o segundo termo do lado direito, são termos que garantem que a soma de todas as probabilidade se tornará 1 no final. Podemos dizer que o primeiro termo é uma constante enquanto o segundo seria uma constante de normalização. Já o terceiro termo é o que realmente nos interessa pois, é nele que encontramos a probabilidade de acordo com a energia fornecida. Então, podemos reescrever a equação 3.63 na forma:

$$P(E) = A e^{-E/kT}, \quad (3.64)$$

onde é mais conhecida como a distribuição de Boltzmann $f_B(E)$

$$f_B = A e^{-E/kT}. \quad (3.65)$$

onde, como já foi dito, A é uma constante de normalização, k é a constante de Boltzmann e a grandeza $e^{-E/kT}$ é conhecida como fator de Boltzmann. Os cálculos de Boltzmann tinham por objetivo investigar as propriedades de uma função de distribuição para as velocidades das moléculas de um gás em equilíbrio térmico, que tinha sido obtida por Maxwell 5 anos antes e mostrar que a distribuição de velocidades

em um gás fora do equilíbrio térmico tendia como passar do tempo para a distribuição de Maxwell.

3.5.1 Distribuição de Maxwell para a velocidade das moléculas

Partindo da estatística de Boltzmann, podemos deduzir enumerar propriedades de sistemas clássicos, uma dessas deduções que vamos realizar é para a distribuição de velocidades das partículas que compõem um gás ideal.

O objetivo é determinar a probabilidade de uma molécula escolhida aleatoriamente esteja contida em um intervalo $P(v_1 < v < v_2)$, nesse caso consideramos que o intervalo de velocidades não seja infinitesimal. Portanto:

$$P(v_1 < v < v_2) = \int_{v_1}^{v_2} D(v) dv, \quad (3.66)$$

onde $D(v)$ é uma distribuição de velocidades que deve ser determinada.

Partindo do princípio que o gás é ideal, a energia que está associada é simplesmente a energia cinética, então a relação pode ser escrita da seguinte forma:

$$E(v) = \frac{1}{2}mv^2. \quad (3.67)$$

A partir daqui devemos interpretar essa velocidade como um vetor com suas componentes x , y e z , ou seja, essa velocidade nada mais é do que o módulo de um vetor. Podemos associar também o vetor velocidade a densidade de possibilidade de uma molécula estar com velocidade v com o fator de Boltzmann da seguinte maneira:

$$\bar{v} : D(\bar{v}) \sim e^{-mv^2/2kT}. \quad (3.68)$$

Para determinar a probabilidade de uma molécula ter a velocidade de módulo v vamos imaginar o vetor v centrado em um plano com os eixos sendo as velocidades v_x , v_y e v_z . A ideia é encontrar a molécula dentro dessa região descritas pelo gráfico, que basicamente é uma esfera de raio v , já que o vetor velocidade pode assumir vários valores distintos.

Se o módulo de v aumenta conseqüentemente o número de estados também aumentam, pois o volume está aumentando e o número de estados é proporcional a superfície da esfera.

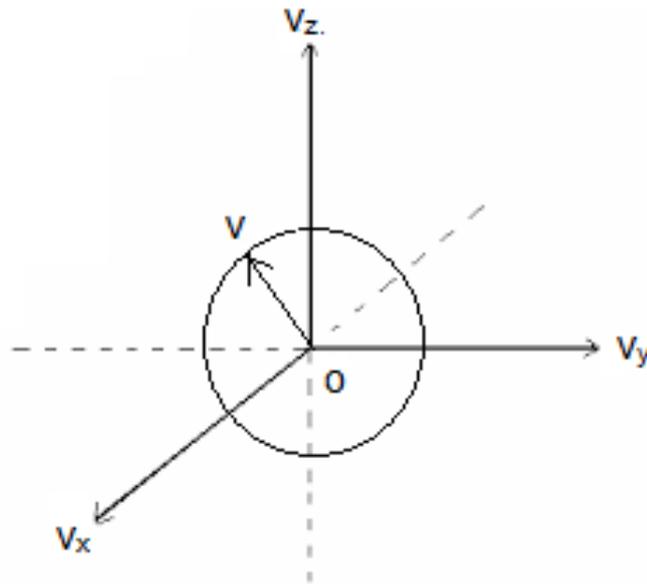


Figura 12: Gráfico para as velocidade das 3 dimensões.

Portanto podemos escrever que:

$$\bar{v} : D(\bar{v}) \sim e^{-mv^2/2kT} 4\pi v^2. \quad (3.69)$$

O fator $4\pi v^2$ é referente a superfície da esfera, para que $D(v)$ se torne uma igualdade devemos inserir uma constante na função e normalizar a função.

$$\bar{v} : D(\bar{v}) \sim A e^{-mv^2/2kT} 4\pi v^2 \quad (3.70)$$

Para normalizar a função temos:

$$\int_0^{\infty} D(v) dv = 1. \quad (3.71)$$

Substituindo o valor de $D(v)$ na integral temos:

$$4\pi A \int_0^{\infty} e^{-mv^2/2kT} v^2 dv = 1. \quad (3.72)$$

Podemos modificar essa integral para torná-la uma integral, para isso vamos definir que:

$$x = \left(\frac{m}{2kT} \right)^{1/2} v.$$

Derivando dx/dv e substituindo na equação 3.59 temos que:

$$4\pi A \int_0^{\infty} e^{-x^2} x^2 \left(\frac{2kT}{m}\right) dx; \left(\frac{2kT}{m}\right)^{1/2} = 1 \quad (3.73)$$

$$4\pi A \left(\frac{2kT}{m}\right)^{3/2} \int_0^{\infty} e^{-x^2} x^2 dx = 1;$$

Se

$$\int_0^{\infty} e^{-x^2} x^2 dx = \frac{1}{4}\sqrt{\pi}.$$

Temos que:

$$4\pi A \left(\frac{2kT}{m}\right)^{3/2} \frac{1}{4}\sqrt{\pi} = 1.$$

$$A \left(\frac{2\pi kT}{m}\right)^{3/2} = 1;$$

$$A = \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2}. \quad (3.74)$$

Substituindo o valor da constante de normalização na distribuição de velocidades 3.57 temos

$$D(\bar{v}) = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} e^{-mv^2/2kT} v^2. \quad (3.75)$$

A distribuição da equação pode ser representada no gráfico abaixo

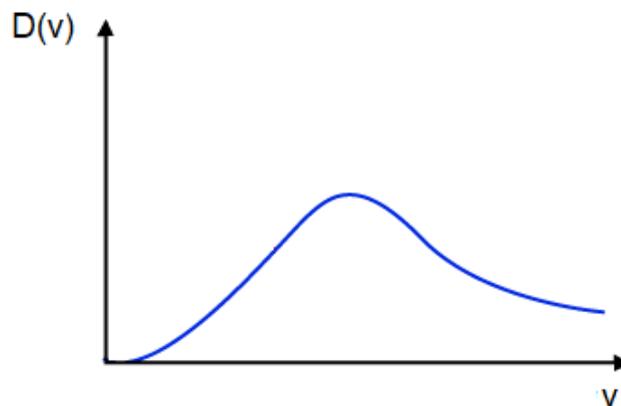


Figura 13: Gráfico da distribuição de velocidades de Maxwell

Podemos a partir dessa distribuição determinar 3 valores importantes, a

velocidade mais provável v_m , que seria basicamente a moda, a velocidade média $\langle v \rangle$ e a velocidade média quadrática v_{rms} .

Analisando a distribuição de velocidades podemos observar que perto de $v = 0$ o fator de Boltzmann se torna dominante, então perto de $v=0$ deveria existir um número muito grande de se encontrar as moléculas mas quando v se aproxima de zero o número de estados que está associado a esse v diminui muito rápido. Apesar da probabilidade para um estado ser grande, existem poucos estados, quando se somam todos, o número de estado fica pequeno. Quando v tende a zero o fator do exponencial vai para um valor constante, mas v^2 vai para zero portanto, perto de v igual a zero o fator de v^2 vai dominar a distribuição. Já olhando o outro extremo para v muito grande, o fator da exponencial se tornará dominante, então a curva será assintótica levando a distribuição para zero.

A velocidade quadrática média pode ser obtida multiplicando a distribuição do módulo da velocidade por v^2 e integrando para todas as velocidades possíveis.

$$\int_0^{\infty} v^2 D(\bar{v}) dv = v_{rms}^2. \quad (3.76)$$

O valor de v_{rms} pode ser obtido imediatamente pois, levando em consideração que a cada velocidade contribui com $1/2kT$

$$\bar{E} = \frac{1}{2}m(\bar{v}_x^2 + \bar{v}_y^2 + \bar{v}_z^2) = \frac{3}{2}kT;$$

$$(\bar{v}_x^2 + \bar{v}_y^2 + \bar{v}_z^2) = v_{rms}^2;$$

$$\frac{1}{2}m(v_{rms}^2) = \frac{3}{2}kT;$$

$$v_{rms}^2 = \frac{3kT}{m};$$

$$v_{rms} = \sqrt{\frac{3kT}{m}}. \quad (3.77)$$

Para determinar a velocidade mais provável v_m basta calcular onde a função é

máxima, em outras palavras tomar o zero da derivada da distribuição.

$$\frac{dD(v)}{dv} = 0.$$

Da eq. 3.57 temos:

$$D(\bar{v}) = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} e^{-mv^2/2kT} v^2.$$

Definindo:

$$C = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2}; \quad (3.78)$$

$$D(\bar{v}) = C e^{-mv^2/2kT} v^2;$$

$$\frac{dD(v)}{dv} = C \left(2ve^{-mv^2/2kT} - v^2 \frac{mv}{kT} e^{-mv^2/2kT} \right);$$

$$C \left(2ve^{-mv^2/2kT} - v^2 \frac{mv}{kT} e^{-mv^2/2kT} \right) = 0;$$

$$Cve^{-mv^2/2kT} \left(2 - v^2 \frac{m}{kT} \right) = 0;$$

$$2 - v^2 \frac{m}{kT} = 0;$$

$$v_m = \sqrt{\frac{2kT}{m}}. \quad (3.79)$$

E por fim vamos agora calcular a velocidade média $\langle v \rangle$ dessa distribuição.

$$\langle v \rangle = \int_0^{\infty} vD(\bar{v})dv; \quad (3.80)$$

$$\langle v \rangle = C \int_0^{\infty} v^3 e^{-mv^2/2kT} dv.$$

Usando integral por parte e definindo:

$$f = v^2, \quad \frac{df}{dv} = 2v;$$

$$g' = ve^{-mv^2/2kT}, \quad g = \frac{vkT}{m}e^{-mv^2/2kT};$$

$$\langle v \rangle = C \left[\left(v^2 \frac{kT}{m} e^{-mv^2/2kT} \right)_0^\infty + \int_0^\infty \frac{2vkT}{m} e^{-mv^2/2kT} dv \right];$$

$$\langle v \rangle = C \left[2 \left(\frac{kT}{m} \right)^2 e^{-mv^2/2kT} \right]_0^\infty;$$

$$\langle v \rangle = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} 2 \left(\frac{kT}{m} \right)^2;$$

$$\langle v \rangle = 4\sqrt{\frac{kT}{2\pi m}};$$

$$\langle v \rangle = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}}.$$

Encontradas as velocidades podemos representar cada uma delas no gráfico anterior.

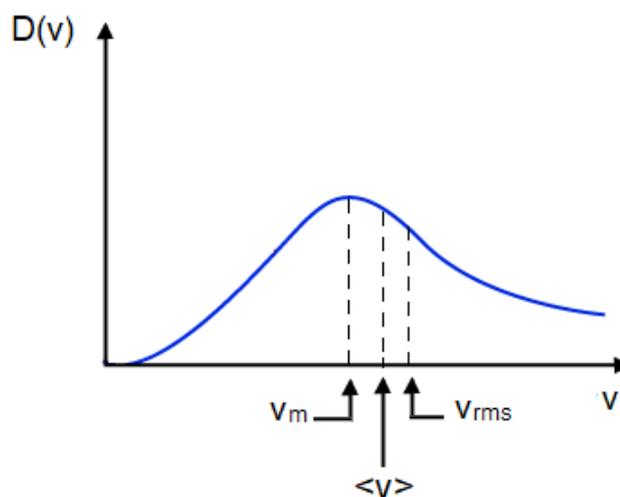


Figura 14: Gráfico com a velocidade média, velocidade quadrática média e a velocidade mais provável.

3.6 Distribuição de Fermi-Dirac

Na seção anterior, vimos que as partículas eram obrigadas a se distribuírem de acordo com a função de distribuição de Maxwell-Boltzmann com a forma de uma gaussiana, dependente de T . Essa função de distribuição pertence a teoria clássica pois, todos seus resultados eram pautados nos fundamentos da física clássica.

Na distribuição de Maxwell-Boltzmann, temos a propriedade que as partículas são distinguíveis, ou seja, idênticas mas distintas.

No entanto, na distribuição de Fermi-Dirac [50], as partículas são indistinguíveis, por exemplo, tome dois elétrons orbitando um átomo, as suas funções de ondas descritas pelos elétrons são similares a o ponto em que os comprimentos de ondas, são menores que a separação entre as partículas.

Outra propriedade que difere a Distribuição de Fermi-Dirac das outras, é que ela obedece o Princípio de Exclusão de Pauli que diz: *"Se já existem n partículas num estado quântico, a probabilidade para que uma outra se junte a elas será reduzida por um fator de inibição de $(1 - n)$ do que seria está probabilidade se não houvesse uma exigência quântica de indistinguibilidade"*.

Antes de dar início ao estudo da distribuição, vamos fazer uma diferenciação rápida entre os materiais condutores, isolantes e semi-condutores, para que fiquem mais claras as propriedades da distribuição de Fermi-Dirac.

Vamos tomar a ligação entre dois átomos de hidrogênio por exemplo, onde suas funções de ondas são representadas por Ψ . Quando os átomos se ligam eles formam o orbital S que pode ser definido pela Ψ^2 que nada mais é, do que a probabilidade de se encontrar o elétron em alguma região do espaço. Para esse primeiro caso foi considerado duas funções de ondas construtivas, mas podemos ter o caso também das funções serem destrutivas, no primeiro caso, formaríamos uma ligação σ e no segundo σ^* . Se for comparadas σ com σ^* , logo podemos dizer que a probabilidade de encontrar um elétron em uma região será maior em σ .

Se fossemos representar em um gráfico essa configuração, seria parecido com a figura 13, onde a região entre as curvas é chamada de Fermi Sea, ou Mar de Fermi, que é justamente nessa região em que a Distribuição de Fermi-Dirac entra.

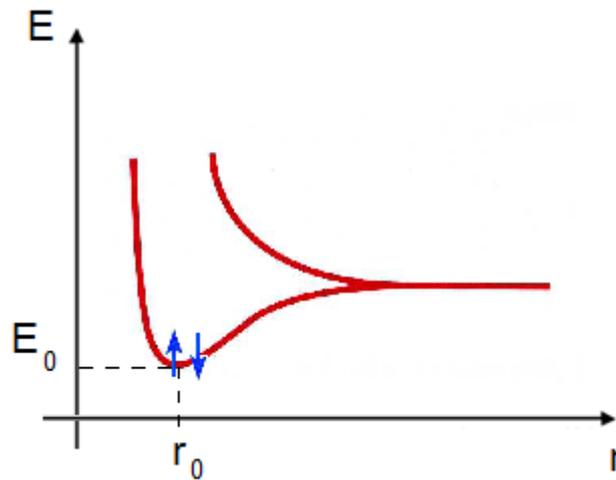


Figura 15: Esquema de desdobramento de níveis de um sistema de dois átomos. Baseado na figura 10.18, Beiser.

Vamos então aplicar essa ideia na formação de um sólido condutor, isolante e semiconductor.

Pensando em um metal simples por exemplo, vamos tomar o Lítio, que possui o número atômico 3. A distribuição eletrônica do Lítio é $Li^3 = 1s^2, 2s^1$, onde a primeira camada K já possui dois elétrons e não participa da ligação enquanto a camada L vai possuir apenas um elétron.

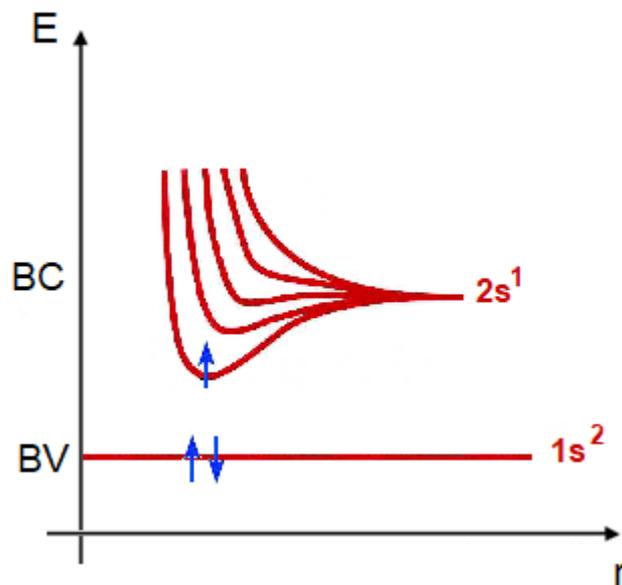


Figura 16: Esquema de desdobramento de níveis para o Li^3 .

Na figura 14 temos o esquema de desdobramento de níveis de um sistema, onde as linhas dentro do mar de Fermi representam o possíveis níveis de energia

disponíveis, para esse caso específico vamos ter $2N$ níveis de energia disponíveis pois, o orbital s permite até dois elétrons. Temos também que nesse caso o orbital $1s$ é a banda de valência enquanto o orbital $2s$ é a banda de condução.

Se por exemplo o elétron recebe um estímulo ele podeira saltar para outro nível e caminha livremente pela banda de condução.

Outro elemento que podemos analisar é o Berílio Be^4 , que possui distribuição eletrônica $Be^4 = 1s^2, 2s^2$, com dois elétrons na camada K e dois elétrons na camada L.

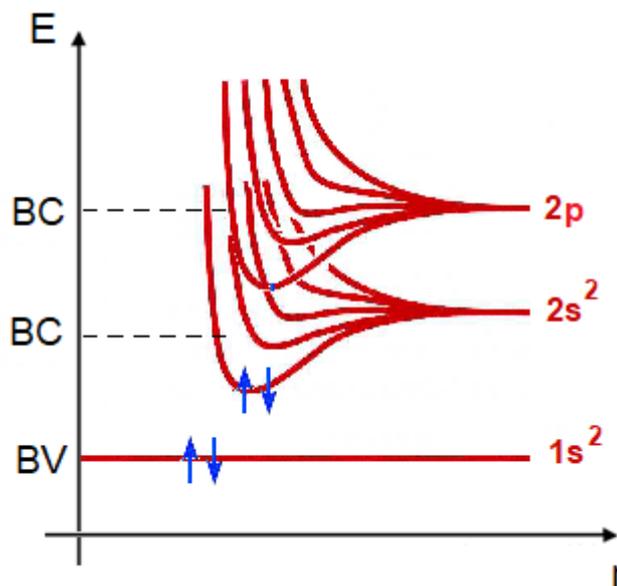


Figura 17: Esquema de desdobramento de níveis para o Be^4 .

No caso do Berílio, supondo N átomos de Berílio para formar um sólido, teremos $2N$ níveis de estados disponíveis, onde cada orbital s possui dois elétrons que já estão preenchidos. Para haver condutividade nesse caso, vamos partir para o orbital $2p$, que formará uma intersecção como orbital $2s$. Inicialmente o orbital $2s$ possui os dois elétrons restante, mas qualquer variação externa de energia permite o elétron acessar os níveis superiores de energia disponíveis, ou seja, como nós estamos partindo do princípio que o Princípio de exclusão de Pauli é respeitado, a partir do momento em que o nível 1 está completo só resta para os elétrons procurarem níveis mais altos de energia.

Nesses dois casos vimos como os condutores se comportam, que pode assumir duas categorias, a do Lítio, onde possui uma banda de condução parcialmente preenchida ou como o Berílio que possui uma sobreposição nas bandas de condução.

Vamos agora analisar como esses níveis de energia se comportam para os isolantes. Como exemplo vamos pegar o diamante, que nada mais é do que uma sobreposição de átomos de carbono. No caso o C^6 com distribuição eletrônica $C^6 = 1s^2, 2s^2, 2p^2$. Vemos que a camada K está completa com dois elétrons, mas a camada L está incompleta, pois a camada L pode receber até oito elétrons e só está com quatro. No entanto, o orbital incompleto do subnível s e os três orbitais do subnível p unem-se, constituindo o fenômeno da hibridização. Quando ocorre a ligação com outro átomo de carbono a ligação será do tipo σ , o que caracteriza um material isolante, para representar a distribuição de energia pelo espaço temos

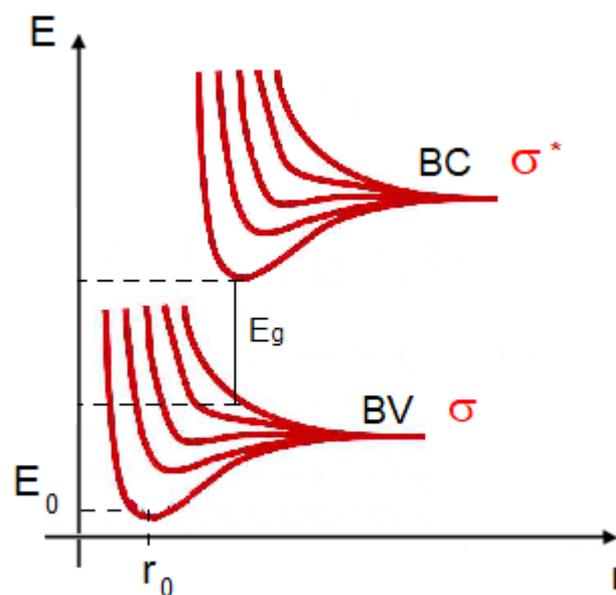


Figura 18: Esquema de desdobramento de níveis para o C^6 .

Nesse contexto, quando se é aproximado inúmeros átomos de carbono se forma a ligação tipo σ preenchendo toda a banda de valência, por outro lado a σ^* fica totalmente vazia, e entre essas bandas vai existir um gap de energia que não permite a passagem do elétron da banda de valência para a banda de condução. Esse gap de energia deverá ser, para os isolantes, superior a 3eV. O que é o que diferencia um material isolante de um semicondutor, nos materiais semicondutores esse gap de energia deverá ser menor do que 3eV. Nos semicondutores por exemplo, só os efeitos térmicos já fazem o elétron sair da banda de valência e passar para banda de condução, em termos de definição de energia podemos dizer que

$$\Delta E = hf, \quad (3.81)$$

onde

$$c = \lambda f \rightarrow f = \frac{c}{\lambda};$$

$$\Delta E = \frac{hc}{\lambda}. \quad (3.82)$$

Levando em consideração que o comprimento da luz visível varia de $0,4\mu\text{m}$ até $0,7\mu\text{m}$, vamos encontrar o intervalo ΔE de energia entre 1,8 eV até 3,1eV, ou seja, se for fornecido um valor de energia entre esse intervalo o elétron será capaz de migrar da banda de valência para banda de condução, possibilitando então a condução elétrica.

Feito essa pequena revisão, podemos agora partir de fato para a Distribuição de Fermi-Dirac. A equação que rege a distribuição é definida por

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{(E-E_F)}{kT}} + 1}, \quad (3.83)$$

onde k é a contante de Boltzmann, T é a temperatura de equilíbrio do sistema e E_F é a energia de Fermi, que é o limite de até onde os estados de energia estão ocupados.

A partir de 3.83 vamos fazer algumas considerações para analisar a distribuição de Fermi-Dirac, considerando uma temperatura de zero Kelvin.

1ª - Se $E > E_F$

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E}{0}} + 1} = \frac{1}{e^\infty} = 0.$$

Portanto, a partir desse resultado podemos dizer que a probabilidade de um elétron ocupar um nível superior a energia de Fermi é zero, onde essa energia de fermi é o limite de estados ocupados e estados vazios.

2ª - Se $E < E_F$

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{-E}{0}} + 1} = \frac{1}{\frac{1}{\infty} + 1} = 1.$$

Portanto, agora nossa probabilidade de um elétron ocupar um nível acima da energia de Fermi será de 100%.

As duas condições anteriores foram feitas sobre a temperatura igual a zero Kelvin, vamos propor agora outras condições com temperaturas acima de zero.

3ª - Se $E = E_F$

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{0}{kT}} + 1} = \frac{1}{1 + 1} = \frac{1}{2}.$$

Pela 3ª condição vemos que se a temperatura tiver um valor acima do zero

absoluto, os níveis de energia começam a serem ocupados.

Plotando esses resultados em gráfico encontramos

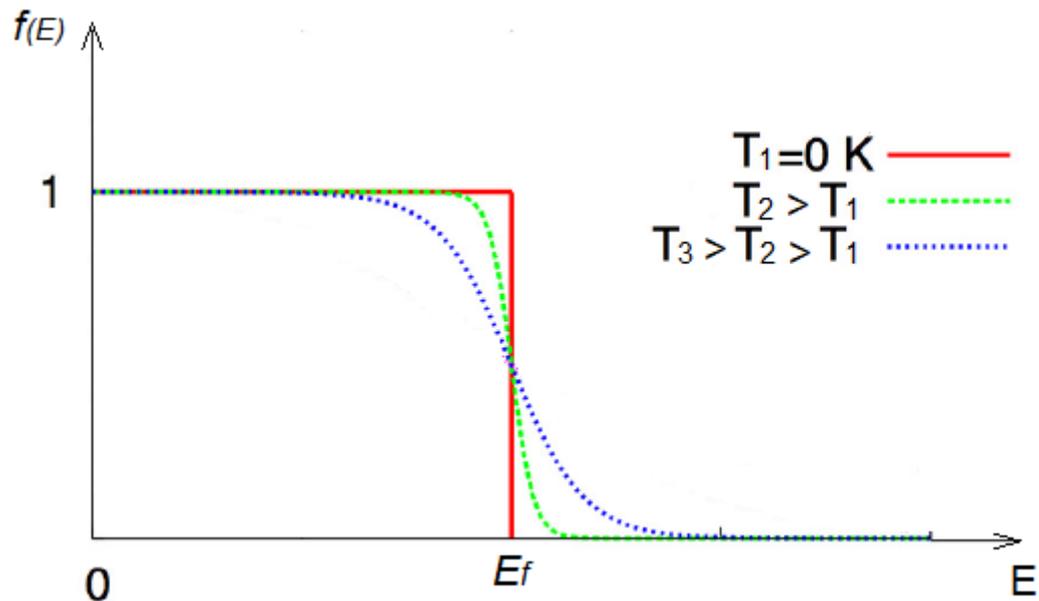


Figura 19: Distribuição de Fermi-Dirac para diferentes temperaturas. No zero absoluto, todos os estados com $E < E_F$ estão ocupados, enquanto os estados $E > E_F$ estão vazios.

Portanto, em $T = 0$, todos os estados com $E < E_F$ são ocupados, e os estados com $E > E_F$ ficam vazios. À medida que T aumenta, os estados com $E > E_F$ também vão sendo ocupados.

4 *Propriedades da condutância nos Nanotransistores*

Neste e no próximo capítulo, vamos abordar a nova perspectiva do transporte eletrônico fazendo referências a antigas análises e em alguns momentos sobrepujando relações entre novos e antigos estudos. A construção teórica desses capítulos está baseada no livro *Lessons from Nanoelectronics - A New Perspective on Transport* [51]. Nessa nova perspectiva vamos introduzir os transistores FET e examinar essencialmente como, e qual é o papel da resistência elétrica, além obviamente, de como é o seu comportamento dentro dos transistores. Por fim vamos determinar as causas do fluxo eletrônico e definir uma equação para a condutância que será explorada no capítulo 5.

4.1 Transistor de Efeito de Campo

Hoje estamos acostumados a carregar cada vez mais aparelhos eletrônicos, sejam eles para trabalhar ou simplesmente para escutar nossa música favorita. Em nossas casas estamos ainda mais acostumados com novas tecnologias, desde a hora que nós acordamos até a hora de dormir, estamos cercados de aparelhos eletrônicos. Criamos então uma dependência que não tem mais volta.

Dentro da maioria desses aparelhos vamos encontrar inúmeros elementos eletrônicos chamados de transistores, e quando digo inúmeros me refiro à bilhões deles, ou seja, em cada dispositivo eletrônico que hoje nós carregamos está preenchido de bilhões de transistores em seus microchips.

Até a década de 90, as limitações que existiam eram no número de transistores existentes em cada microchip, o processo de miniaturização ainda não estava desenvolvido a ponto de se dar um salto em termos de melhorias. Na época por exemplo, o espaço ocupado por um transistor era de $10\ \mu\text{m} \times 10\ \mu\text{m}$, então em um

chip de 3,0 cm x 3,0 cm cabiam 9 milhões de transistores, o que já era um bom número. Hoje com o processo de miniaturização mais sofisticado, é possível construir um transistor com um espaço de $1,0 \mu\text{m} \times 1,0 \mu\text{m}$, o que possibilita colocar no mesmo chip de 3,0 cm x 3,0 cm 900 milhões de transistores, ou seja, quase 1 bilhão deles. Isso sim representa um salto bastante expressivo na evolução dos microchips.

Existem vários tipos de transistores, mas hoje o mais comum usado nas indústrias são os do tipo FET que é o acrônimo em inglês de Field Effect Transistor, Transistor de Efeito de Campo, que, como o próprio nome diz, funciona através do efeito de um campo elétrico na junção. Este tipo de transistor tem muitas aplicações na área de amplificadores (operando na área linear), em chaves (operando fora da área linear) ou em controle de corrente sobre uma carga. Os FETs têm como principal característica uma elevada impedância de entrada, o que permite seu uso como adaptador de impedâncias podendo substituir transformadores em determinadas situações. Além disso, são usados para amplificar frequências altas com ganho superior ao dos transistores bipolares.

Para esse trabalho vamos considerar que esse transistor bem, mas bem simples, em funcionamento é essencialmente um resistor regulado por tensão, consistindo de um canal (channel) com dois terminais chamados de fonte (source) e dreno (drain). Em algumas configurações podemos adicionar outro terminal chamado de porta (gate).

A fonte e o dreno são os terminais que são ligados em uma bateria, e há possibilidade de se ligar uma outra tensão entre a fonte e a porta. E entre a porta e o canal existe um isolante.

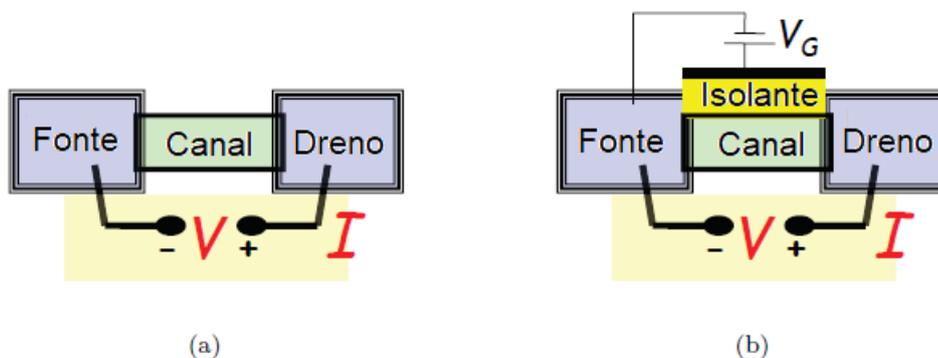


Figura 20: (a) Transistor de Efeito de Campo (FET) Basicamente é um resistor composto por um canal que liga dois contatos, a fonte e o dreno, que estão ligados por uma bateria. (b)

Um ponto importante que podemos destacar, é que a resistência pode ser alterada em um intervalo de valores grandes dependendo da tensão V_G aplicada entre a fonte a porta. Em um estalo desligado por exemplo, a resistência fica m trono de $100\text{ M}\Omega$ enquanto em um estado ligado a resistência gira em torno de $10\text{ k}\Omega$.

Hoje nas industrias, são usados pares de transistores funcionando alternadamente. Quando um muda sua resistência de $100\text{ M}\Omega$ para $10\text{ k}\Omega$ o outro faz o inverso, muda de $10\text{ k}\Omega$ para $100\text{ M}\Omega$. Juntos eles formam um inversor cuja a saída e entrada são contrárias. Uma baixa tensão na entrada cria uma alta tensão na saída enquanto o contrário ocorre no outro transistor.

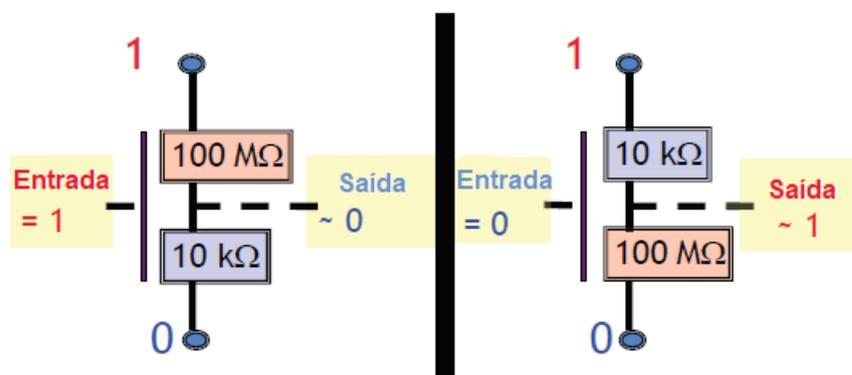


Figura 21: Esquema de um switch com um par de transistor.

O que faz um computador ser tão potente, são os números desses transistores e a velocidade de inversão em que os transistores executam, que ficam na casa dos nano segundos. E como já citado anteriormente, na década de 90 existiam um número menos expressivos se comparado com a tecnologia atual.

Agora, o limite para se ter outro salto na microeletrônica é como reduzir ainda mais o tamanho de seus componentes e como solucionar um velho problema relacionado ao aquecimento.

Neste capítulo não vamos nos focar nessa parte especifica da microeletrônica, e sim nas suas características do fluxo de corrente e na energia derivada desses componentes.

Para dar início nessa parte vamos falar da Condutância.

4.2 Condutância

De forma simplificada, a condutância é o inverso da resistência elétrica. Enquanto a resistência elétrica se opõe a passagem da corrente elétrica, a condutância é a capacidade de conduzir corrente elétrica. A resistência elétrica é regida pela equação:

$$R = \frac{\rho L}{A}, \quad (4.1)$$

onde ρ é a resistividade elétrica, A é a área de secção transversal e L o comprimento do condutor. Já o ρ , depende do tipo do material do condutor.

A formula que rege a condutância tem a seguinte forma:

$$G = \frac{\sigma A}{L}. \quad (4.2)$$

Bem similar a da resistência, o que já era de se esperar. No caso há uma inversão de L e A entre as formulas que representam a mesma coisa na resistência, o termo σ é o análogo ao termo ρ , que é chamado de condutividade. Então quanto maior a condutância maior é a corrente que passa pelo condutor.

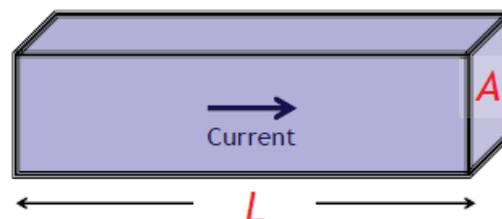


Figura 22: Condutor da área superficial A e comprimento L .

Se nós fizermos uma análise para tentar entender como funciona a condutividade dentro de um condutor, devemos lembrar do comportamento de um elétron viajando dentro do próprio condutor. Nós já vimos que o livre caminho médio era a distância que o elétron percorria antes de se chocar com a rede cristalina e mudar sua direção. Esse movimento se caracteriza como um deslocamento difuso, ou seja, que há uma mudança em duas direções em cada choque com a rede.

O livre caminho médio que o elétron descrevia antes de se chocar com a rede, em semicondutores comuns tinha dimensões de micrômetros, mas isso pode variar dependendo da temperatura do material.

Uma das perguntas que surgem dessa análise, é que a resistência depende do comprimento do condutor, que no caso da figura 20 é o nosso canal, mas se o comprimento do canal for proporcional ao livre caminho médio a ponto em que o elétron possa atravessar em linha reta como uma bala, ou seja, um movimento balístico. Será que a resistência ainda continuaria sendo proporcional ao comprimento L ? E outra, teria sentido em falar em resistência?

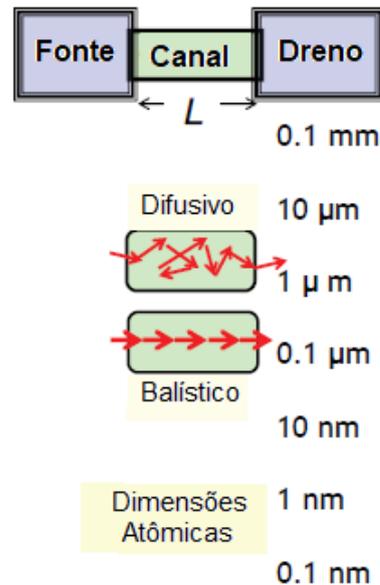


Figura 23: A cada salto de geração, o comprimento do canal do transistor foi ficando cada vez menor.

Graças a evolução da tecnologia essas perguntas podem ser respondidas, mas nem sempre foi assim, até quase 3 décadas atrás, só se podia especular os resultados. Hoje experiências realizadas em laboratório já foram capazes de medir até a resistência de uma molécula de hidrogênio, que é um enorme passo para análises do comportamento condutivo dos materiais.

4.2.1 Introdução da Condutância Balística

Como já foi citado anteriormente, esse não é um trabalho sobre a microeletrônica em si e suas características, o que vamos fazer aqui é nos apropriar de suas teorias e utilizar no nosso estudo. Dito isso, podemos escrever agora a resistência de outra forma, uma forma onde estamos levando em conta o caráter balístico da condução

elétrica. Segue então que a resistência balística R_B tem a forma:

$$R_B = \frac{h}{q^2} \frac{1}{M}, \quad (4.3)$$

onde q (carga do elétron) e h (constante de plank) são constantes fundamentais e o valor de $h/q^2 \sim 25 \text{ k}\Omega$. Já o M da equação é descrito por “modos”, que seriam os números de canais disponíveis para a condução. Se a condutância é o inverso da resistência então a condutância balística tem a forma:

$$G_B = \frac{q^2}{h} M. \quad (4.4)$$

Um ponto importante que veremos é o termo M , ele é um dos termos mais importantes da nano eletrônica e física mesoscópica e será detalhado no capítulo 5, assim como as equações 4.3 e 4.4.

4.2.2 Interpretação da Resistência Balística

Até tempos atrás, nós determinávamos a resistência e a condutância focando no comprimento do condutor. Até um limite de dimensão usávamos a equação 4.2, o que nos foi ensinado no início de nossa vida acadêmica. Já para uma dimensão mesoscópica, devemos utilizar a eq 4.3, já que quando mudamos a escala, devemos também interpretar a física de outra forma. Com isso, podemos dizer que devemos separar bem o que usar e quando usar. E a ideia dessa parte é apresentar uma nova perspectiva, da qual se é possível escrever a condutância para longos condutores partindo da eq 4.3, que pode ser escrita na forma

$$G = \frac{G_B}{1 + \frac{L}{\lambda}}, \quad (4.5)$$

onde λ é o livre caminho médio.

O que vai diferenciar agora o condutor balístico e difusivo será a análise entre o comprimento L e o livre caminho médio λ .

Para $L \ll \lambda$, podemos desprezar o L na eq 4.5 se reduz a própria condutância balística $G \simeq G_B$.

Para $L \gg \lambda$, um condutor muito longo, podemos ignorar o livre caminho médio λ tornando a eq 4.5 da forma:

$$G \simeq G_B \frac{\lambda}{L}. \quad (4.6)$$

Obtemos agora uma equação para condutância que é inversamente proporcional ao comprimento L do condutor, o que se já era de esperado para condutores longos apresentado pela eq 4.2, que também é inversamente proporcional ao comprimento do condutor.

Comparando a equação 4.6 com a 4.2, podemos encontrar uma nova equação para a condutividade:

$$\frac{\sigma A}{L} = G_B \frac{\lambda}{L},$$

$$\sigma = G_B \frac{\lambda}{A}, \quad (4.7)$$

$$\sigma = \frac{q^2 M}{h A} \lambda. \quad (4.8)$$

O que podemos observar com esse resultado, é a nova perspectiva da condução. Partimos do cálculo da condutância para um fio muito curto, e acabamos encontrando que a condutância para esse caso se aproximava da condutância balística, mas se esse condutor fosse se prolongando, a condutância se aproximava da condutância balística vezes o livre caminho médio.

Temos também, que a condutividade σ para um comportamento difuso em um condutor longo dependente da razão M/A , o que geralmente é relacionado ao comportamento balístico nos condutores.

Visto isso podemos fazer uma outra observação em relação a condutividade pois, geralmente as equações que envolvem a condutividade estão relacionadas com outras propriedades, como por exemplo, a formula de Drude, que pode ser escrita como

$$\sigma = q^2 \frac{n}{m} \tau_m. \quad (4.9)$$

Onde podemos ver que a condutividade depende da massa efetiva, que pode ser visto como um outro problema pois, em alguns casos fica difícil escrever as configurações em termos de massa, nos fazendo buscar outra formula para descrever a condutividade, que no caso pode ser uma que envolva a densidade de estados (D) e o coeficiente de difusão \bar{D} como

$$\sigma = q^2 \frac{D}{AL} \bar{D}. \quad (4.10)$$

O que torna uma expressão mais generalizada para se escrever a condutividade.

Até agora, fizemos várias análises da condutância e da condutividade esboçando seu comportamento balístico, buscando uma equação geral que fosse suficiente para casos onde o tamanho do condutor não determinava o tipo de teoria que era aplicado. Neste ponto, podemos buscar também uma relação para a resistência cujo o tamanho do condutor não seja um limite de até onde se deva usar ou não um conceito, ou uma fórmula.

Vamos inicialmente combinar as equações 4.5 e 4.8 para substituir a Lei de Ohm padrão 4.1, fazendo isso encontramos

$$G = q^2 \frac{\sigma A}{L + \lambda} \rightarrow R = \frac{\rho}{A} (L + \lambda). \quad (4.11)$$

Devemos observar aqui, que para aplicar o caráter balístico $L \ll \lambda$, fazendo isso podemos desprezar L levando a equação que relaciona a resistência para um canal balístico para a forma

$$R_B = \frac{\rho \lambda}{A}. \quad (4.12)$$

Mas aí caímos em outro problema pois, a eq 4.12 está associando a resistência balística com o livre caminho médio, entretanto, o livre caminho médio por si só não é significativo para um canal balístico. Uma forma melhor de se escrever a resistência para uma configuração onde há caráter balístico, é usando o inverso da equação 4.5 e com isso encontramos

$$R = R_B \left(1 + \frac{L}{\lambda} \right), \quad (4.13)$$

$$R = \frac{h}{q^2} \frac{1}{M} \left(1 + \frac{L}{\lambda} \right). \quad (4.14)$$

Assim como fizemos para a condutância, podemos fazer a mesma análise para a resistência para verificar se a eq 4.13 faz sentido com tudo o que falamos até esse ponto.

Para a primeira parte, vamos analisar o caso em que $L \ll \lambda$. Para esse caso podemos desprezar o termo L/λ , reduzindo a resistência R na resistência Balística.

Para $L \gg \lambda$, um condutor muito longo iremos ter centenas de livres caminhos médios, então podemos ignorar o número 1 pois, ele não irá fazer diferença na conta. Fazendo isso vemos que a resistência é proporcional ao comprimento do condutor, o

que está de acordo com a Lei de Ohm padrão vista anteriormente.

Isto é o que havíamos citando no início do capítulo, vimos que essa nova perspectiva está relacionada com as teorias já bem estabelecidas lá a trás.

4.2.3 Onde se encontra a resistência?

Nossa interpretação de resistência elétrica, está associada a oposição da passagem de corrente elétrica quando existe uma diferença de potencial elétrico em um ponto do condutor, ou seja, nós procuramos onde a voltagem cai e associamos isso com a resistência pela Lei de Ohm. Entretanto, isso não está de todo o certo se partindo da nossa nova perspectiva. Nós estamos tratando a resistência com um novo olhar e isso acarreta em alguns ajustes na teoria. Portanto, temos três pontos importantes a serem discutidos. O primeiro ponto é impulsionado da própria equação 4.13

$$R = R_B \left(1 + \frac{L}{\lambda} \right),$$

onde podemos escrever a equação na forma:

$$R = R_B + \frac{R_B L}{\lambda}. \quad (4.15)$$

Ou seja, a resistência total pode ser dividida em duas partes, onde podemos associar a parte R_B independente do comprimento dos contatos, e a parte $R_B L/\lambda$ depende do comprimento ao próprio canal.

Partindo do princípio da Lei de Ohm, deve haver uma queda no potencial na fonte, seguida depois por uma queda no canal e por fim uma outra queda do potencial no dreno, como mostra a figura 24.

Pela figura, podemos observar que a resistência independente do comprimento foi dividida em duas partes, pois existem dois condutores e como a configuração é em série o resultado da soma das 3 resistências não viola a equação para a resistência total. A figura também mostra como é o perfil espacial do potencial, e a queda em cada parte do “circuito”.

O problema dessa configuração é o que nos leva ao segundo ponto. Como podemos desenhar esse perfil espacial do potencial eletrostático, quando estamos trabalhando em nano escalas? Sabemos que é difícil e não indicado, trabalhar com potenciais eletrostáticos, mas sim com potenciais eletroquímicos. O que leva a uma

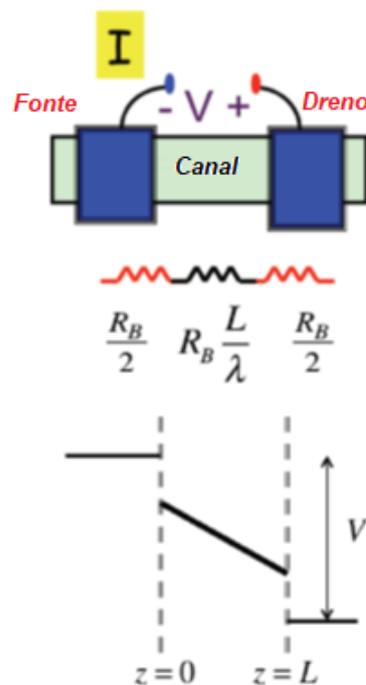


Figura 24: Representação esquemática .

discussão sobre de fato qual usar pois, ainda existe quem defenda a utilização de potenciais eletrostáticos, mesmo que na literatura o potencial eletroquímico esteja bem estabelecido. Mais adiante para corroborar, veremos conceitos novos demonstrando que a corrente é impulsionada pelo gradiente do potencial eletroquímico.

E por fim, o terceiro ponto que vamos discutir é relacionado ao calor gerado nesse transistor.

Quando falamos de calor em circuitos ou equipamentos eletrônicos, a primeira coisa que nos vem à cabeça é o efeito Joule, que diz basicamente que o aquecimento de um resistor é proveniente das colisões dos elétrons livres com a rede cristalina do condutor, em que o momento é transferido para a rede aumentando sua energia, ou seja, quando os elétrons colidem com os átomos, fazem com que os núcleos vibrem com maior intensidade.

Portanto, a passagem da corrente elétrica num condutor provoca o aumento de temperatura que dissipa o calor. Nesse processo há uma transformação de energia elétrica em energia térmica e essa energia é diretamente proporcional a resistência elétrica, ao quadrado da corrente e ao tempo. E pode ser representada matematicamente por

$$E = Ri^2 \Delta t. \quad (4.16)$$

Neste ponto, o importante é notar que a energia está relacionada com a resistência do percurso da corrente elétrica, então pela figura anterior quando há corrente elétrica passando pelo circuito devemos esperar que o aquecimento em cada região deva ser proporcional à resistência de cada região, aquecendo o canal e os terminais fonte e dreno.

Mas através de experimentos realizado em laboratório, foi observado que em condutores em nano escala as coisas não são dessa forma, o calor gerado se concentra mais nos terminais fonte e dreno pois, devemos lembrar que temos um movimento balístico, e com isso a ideia de ter menos aquecimento no canal não é de todo o estranho, ou seja, a troca de energia fica concentrada mais nos terminais.

Outra observação feita também através de experimentos, é que se o calor fosse todo concentrado no canal certamente ele iria queimar, já que se comparado com os terminais suas dimensões são bem menores.

No caso desse transistor, mesmo que a maior parte do calor se localiza nos terminais, podemos dizer que a resistência está localizada no próprio canal pois, quem controla o fluxo de elétrons é o próprio canal.

Vamos tomar a figura 25 como exemplo. No meio do canal á uma falha, representada por um buraco, que vai ocasionar naquela região um fluxo menor de elétrons. Conseqüentemente, naquela região o calor tenderia a aumentar devido à dificuldade da passagem de elétrons, mas como já citado anteriormente, não é isso que ocorre. Como o calor é proveniente da transferência de energia dos elétrons para o canal, e esse canal agora tem menos "espaço" para interagir com os elétrons na forma de choque, não há como ocorrer essa transferência, ou seja, não há como ocorrer a dissipação pelo meio [52].

Outro ponto de vista que é similar ao de se pensar que se a resistência aumenta o aquecimento também aumenta, é associar o potencial eletroquímico com a energia do elétron.

A figura 25 mostra o perfil espacial de um potencial eletroquímico bem definido para o transistor.

Certamente a resistência do canal irá aumentar, porque o buraco vai fazer com que o fluxo diminua, isso não está em discussão, o que queremos debater aqui é a forma tradicional que já conhecemos.

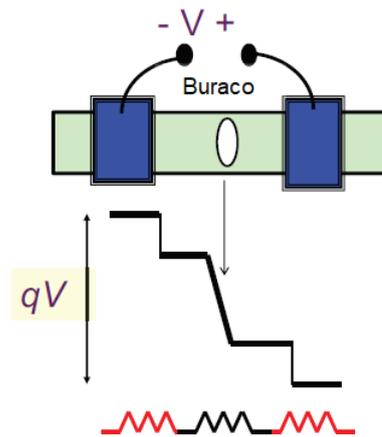


Figura 25: Perfil de um condutor com uma falha em seu interior.

4.3 Resistores Elásticos

Uma vez visto que a resistência não está associada ao aquecimento dos resistores, podemos modular resistores em nano escala chamados de resistores elásticos, ou resistores de Landauer [53]. Nesse resistor temos uma imagem idealizada do canal, onde não ocorre nenhuma perda de energia e por consequência não há dissipação de calor, limitando toda a troca nos contatos. O que acaba sendo um conceito de acordo com a proposta de um resistor balístico.

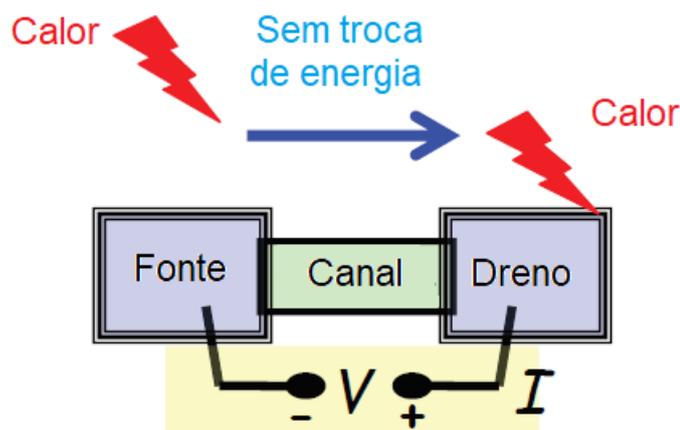


Figura 26: Em um resistor elástico as trocas de calor se concentram nos contatos.

Várias evidências experimentais, mostraram que os condutores em nano escala reais realmente se comportam como a imagem idealizada do modelo em questão. Com a evolução da física mesoscópica os resistores elásticos se tornaram muito utilizados no final dos anos 80, e é frequentemente referida como a abordagem de Landauer.

Vamos mostrar mais adiante com esse modelo, que até em uma condução difusiva, onde há uma variação no momento, o calor irá se dissipar nos condutores. Além de permitir calcular sua resistência.

A partir desse modelo, podemos extrapolar essa teoria e tratar resistores longos como vários resistores elásticos pequenos em série para calcular essa resistência.

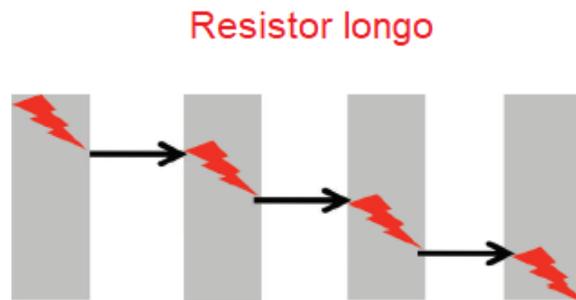


Figura 27: Esquema que representa um resistor longo análogo à resistores elásticos em série.

Se essa ação for feita com algumas simplificações na teoria, tudo leva a crer que os resultados são satisfatórios. Para mostrar isso, vamos imaginar um circuito simples mostrado na figura 28, onde temos um resistor elástico com cais de energias E_1 , E_2 e E_3 independentes e sem fluxo de elétrons entre eles.

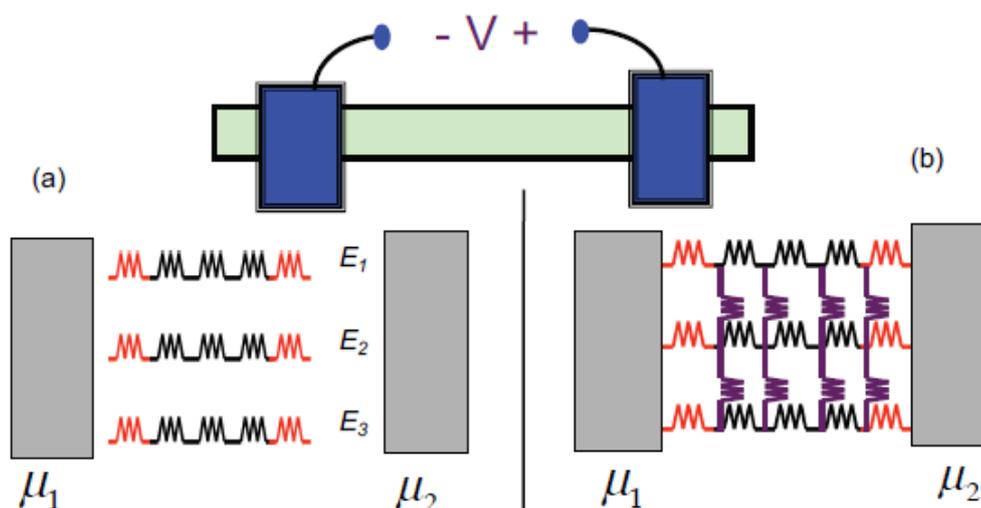


Figura 28: a) resistor elástico com cais de energias E_1 , E_2 e E_3 independentes e sem fluxo de elétrons entre eles. b) em processos inelásticos aparece uma corrente vertical como se novos resistores aparecessem no canal.

Na parte (a) da figura temos resistores elásticos, onde não há correntes entre eles, ou seja, a corrente segue sempre na horizontal. Já na parte (b) temos resistores

que possibilitam processos inelásticos, induzido um fluxo vertical entre os canais de energia, representados pelos resistores verticais.

A dúvida principal é quando podemos ignorar o fluxo vertical? A resposta é que para se ignorar esses resistores verticais, primeiro eles devem ser idênticos tornando os nós conectados pelos resistores equipotenciais. Ai sim não haverá corrente entre eles e poderemos ignorar esses resistores.

Mas essa análise é feita se os canais conduzem bem. Se for o caso de não conduzirem bem, o fluxo vertical não poderá ser ignorado. Por exemplo, vamos imaginar que os canais E_2 e E_3 conduzam mal comparado com E_1 . Naturalmente o fluxo seguirá para cima à esquerda e para baixo à direita. Podemos ainda forçar esse fluxo se o contato esquerdo conectar somente o canal E_1 , enquanto o contato direito conectar somente com E_3 . Nesses dois casos o fluxo vertical não poderá ser ignorado tornando esse processo inelástico.

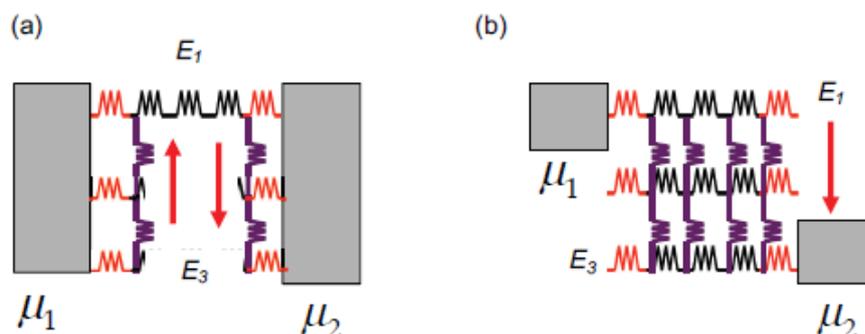


Figura 29: Esquema de processo inelástico.

O que podemos concluir com esta abordagem, é que geralmente podemos ignorar os processos de condução inelásticas, desde que sejam feitas algumas simplificações em relação ao momento. Também através dessa análise, os resistores elásticos fornecem bons resultados para a descrição de condutores curtos e até para os longos.

4.4 Teorias de Transporte

Para entender as teorias do transporte, vamos usar dois diferentes ramos da física que evoluíram de forma independente, mas que no transporte estão misturados. O primeiro deles que envolve a transferência elástica está relacionado com a mecânica, que é descrita pelas Leis de Newton ou em forma quântica descrita pelas equações de Schrodinger. Já o outro envolve a geração de calor, e está relacionada pelas Leis da

Termodinâmica. Vale destacar que o primeiro ramo está ligado a forças ou potenciais, depende de como será abordado o transporte e que são processos reversíveis. Já o segundo ramo, está ligado a entropia que é um processo irreversível.

Trabalhar com esses dois ramos da física misturados, que são muito distantes, parece uma tarefa árdua, pois requer métodos bem avançados de mecânica estatística, para integrar a parte da mecânica com a parte da termodinâmica. Mas para nossa sorte podemos separar os dois e trabalhar com eles de forma independente.

Para a primeira parte, podemos usar a Equação de Transporte de Boltzmann (BTE – Boltzmann's Transport Equation) para trabalhar com a mecânica newtoniana combinada com processos termodinâmicos. A equação BTE é até hoje a mais aceita quando o assunto se refere a teoria do transporte semiclássico.

Já quando estamos falando do transporte puramente quântico, onde o elétron se comporta como onda, devemos combinar as equações de Schrodinger com a termodinâmica, mas a partir daí não podemos mais usar a BTE e sim a Função de Green fora do equilíbrio (NEGF – non-equilibrium Green's function) método originário na década de 1960 das obras seminais de Martin e Schwinger.

Essa clara separação entre os conceitos no transporte semiclassico, tornam os resistores elásticos conceitualmente mais simples de se trabalhar. Fica claro que os processos que envolvem a parte da mecânica estão localmente localizados no canal, enquanto a parte da entropia está localizada nos próprios contatos, o que não é uma grande surpresa pois, intuitivamente temos essa percepção do todo.

Já quando estamos nos referindo ao transporte quântico, podemos também usar o mesmo ponto de vista anterior e aplicar aqui. Por exemplo, a figura 30 mostra um gráfico do perfil espacial do potencial eletroquímico da figura 25 já vista anteriormente, mas agora podemos utilizar a BTE e o método NEGF para analisá-la.

Para o método NEGF, mostramos três opções. Primeiro, um modelo coerente (à esquerda) que ignora toda interação dentro do canal, mostrando oscilações indicativo de ondas estacionárias. Depois de incluirmos o relaxamento de fase, a interferencia construtiva e destrutivas são perdidas e obtemos o resultado no meio que se aproxima do resultado semi-clássico. Se incluimos as interações de relaxamento do momento, obtemos um perfil indicativo de uma resistência distribuída adicional.

Nenhum desses modelos inclui relaxamento de energia e todos eles se qualificam como resistores elásticos, tornando a teoria muito mais simples que um modelo

de transporte quântico que inclui processos dissipativos. No entanto, todos eles exibem uma variação espacial no potencial eletroquímico consistente com nossa compreensão intuitiva da resistência.

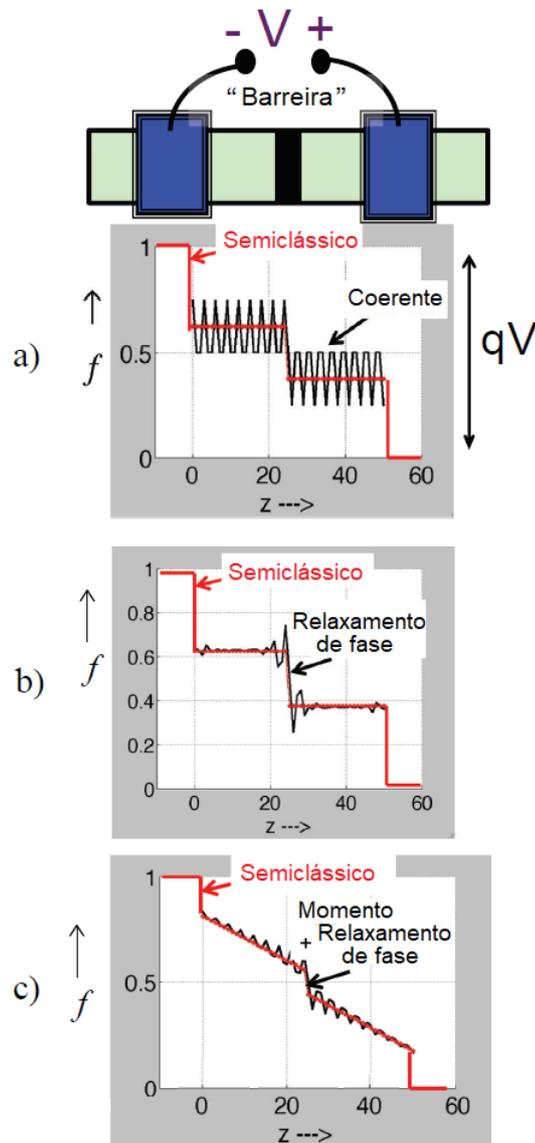


Figura 30: Moléculas de gás em recipiente cilíndrico.

4.4.1 Fluxo de Elétrons

Quando desejamos utilizar algum equipamento eletrônico, geralmente precisamos de energia elétrica para ligá-lo. Tal energia é obtida quando ligamos o equipamento em uma tomada ou até mesmo em uma pilha. A partir daí, os elétrons livres no condutor que estavam se movendo de maneira aleatória, passam a se mover de maneira ordenada, o que nós chamamos de corrente elétrica.

Para se adquirir essa corrente elétrica, se faz necessário aplicar um campo elétrico no condutor. Com esse campo elétrico, teremos diferentes níveis de energia potencial e esses níveis de potencial nós chamamos de diferença de potencial ou simplesmente ddp.

Bem, isso é o que a maioria das pessoas vão dizer se forem questionadas o que faz os elétrons fluírem por um conduto. No entanto, essa resposta infelizmente está incompleta na melhor das hipóteses.

Porém, com o progresso da nanoeletrônica podemos dar outro panorama para resposta dessa pergunta. E para isso vamos definir e explorar dois conceitos-chaves.

O objetivo aqui, é descrever o fluxo de corrente em nano dispositivos quando uma voltagem é aplica. Para isso vamos definir o primeiro conceito chave que é a densidade disponível de estados, que são basicamente os níveis de energia disponíveis no canal.

Se pensarmos por exemplo no átomo de hidrogênio, seus níveis de energia são discretos e separados por alguns elétron-Volts. Enquanto em outros matérias mais complexos os níveis de energia se tornam menos espaçados e mais densos levando a necessidade de se definir a densidade de estados.

Nesse caso, vamos determinar a densidade disponível dos estados $D(E)$ como uma função da energia E , como segue e figura 31.

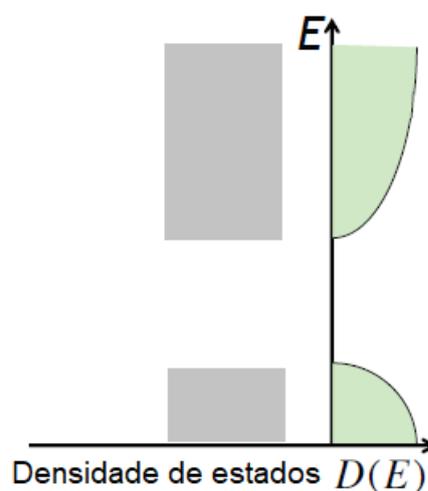


Figura 31: Gráfico da Densidade de estados pela energia.

Outro ponto importante também é saber localizar o potencial eletroquímico μ_0 de equilíbrio, separando os estados preenchidos dos estados vazios. Que como já citado,

é a linha que demarca os estados cheios dos vazios, ou seja, a $0K$ todos os estados $E < \mu_0$ estão preenchidos enquanto todos os $E > \mu_0$ estão vazios. Anteriormente na distribuição de Fermi-Dirac definimos o potencial eletroquímico como energia de Fermi E_F , mas como o autor utiliza outra notação, vamos seguir igual o autor.

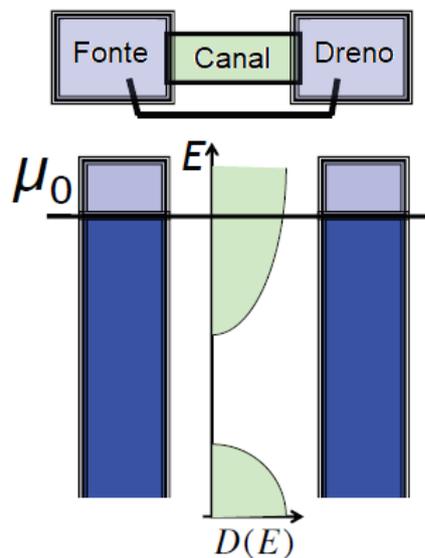


Figura 32: Condutores com potencial eletroquímico em equilíbrio.

A figura 32 representa um gráfico da densidade de estado pela energia, não há voltagem ($V=0$), o dispositivo está em equilíbrio. A linha μ_0 representa o potencial eletroquímico que também pode ser chamada de nível de Fermi, que separa os estados preenchidos, dos estados vazios. Acima da linha estão os estados vazios e abaixo da linha estão os estados preenchidos.

4.4.2 Função de Fermi

Anteriormente afirmamos que na temperatura de $0K$ todos os estados $E < \mu_0$ estão preenchidos enquanto todos os $E > \mu_0$ estão vazios. Isso só ocorre quando a temperatura é de fato $0K$. Mas se você estiver em temperaturas diferentes de zero, a distribuição de elétrons deverá ser calculada de outra forma, ou seja, se a temperatura subir um pouco alguns elétrons podem ganhar energia e subir para a região onde estava vazia, que se localiza acima da linha do potencial eletroquímico. Conhecida a densidade de estados, a próxima etapa é saber quais estados estarão ocupados por elétrons. Para responder esta questão devemos levar em conta os resultados dados pela mecânica estatística vista no capítulo 3. A função estatística válida para

descrever a distribuição mais provável de elétrons em estados quânticos é a função de Fermi dado por

$$f(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E-\mu}{kT}\right) + 1}. \quad (4.17)$$

E o gráfico que representa essa função tem a seguinte forma:

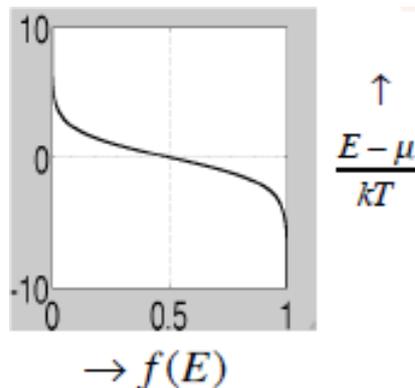


Figura 33: Representação gráfica da função de Fermi.

O gráfico da função de Fermi nos mostra que as energias muito abaixo de μ levam a função para 1, que seria o 100% do preenchimento, o que já era de se esperar pois, os níveis mais baixos estão todos preenchidos. Já por outro lado na parte de cima onde a energia supera o potencial o esperado é que estejam vazios, então naturalmente levam a função para o zero. Portanto a função tem um intervalo de 0 até 1.

Isso se confirma se nós usarmos a própria equação de Fermi. Quando a quantidade $(E - \mu)$ é negativa, ou seja, estados com energias baixas, a exponencial desse fator tende a zero levando a função para o valor de 1. Agora, se o valor da energia for grande, ele vai levar a exponencial para um valor muito grande levando a função para um valor próximo de zero, o que foi mostrado no gráfico.

Nós podemos também propriedades quando temos o alargamento térmico, fazendo isso vamos encontrar outro gráfico para a distribuição. A ideia aqui é derivar a função de Fermi e multiplica-la por kT , para torná-la adimensional.

Partindo da eq 4.17, podemos mostrar que

$$F_T(E, \mu) = kT \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) = \frac{e^x}{(e^x + 1)^2}, \quad (4.18)$$

onde $x = (E - \mu) / kT$

Da eq. 4.18 segue que

$$F_T(E, \mu) = F_T(E - \mu) = F_T(\mu - E), \quad (4.19)$$

Da eq. 4.18 e 4.17 segue que

$$F_T = f(1 - f), \quad (4.20)$$

Se integrarmos F_T sobre toda a energia e igualarmos a kT termos:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dE F_T(E, \mu) = kT \int_{-\infty}^{\infty} dE \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) = kT [-f]_0^{\infty} = kT(1 - 0) = kT. \quad (4.21)$$

Com isso a função se comporta como se fosse um pulso, com o nível de energia próximo do potencial ($E = \mu$), com valor máximo de $1/4$ e largura próximo de $4kT$ como o gráfico a seguir:

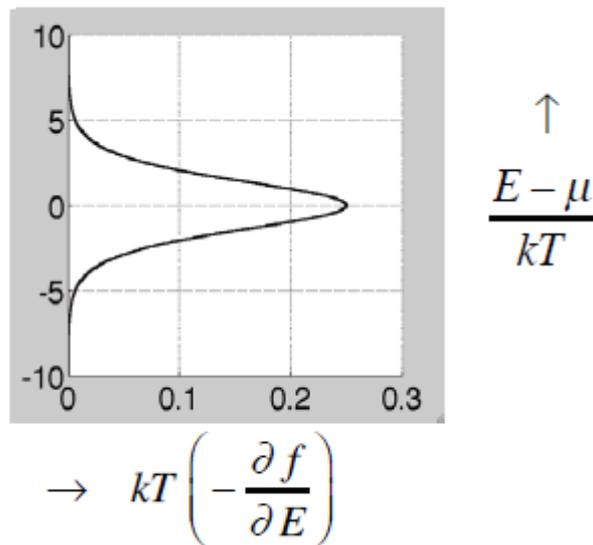


Figura 34: Função de Fermi normalizada.

O importante neste resultado, é que nós devemos usar a derivada da função de Fermi e não a própria função pois, a derivada vai representar a faixa de energia onde vai ocorrer toda a condução, que geralmente é proporcional a uma faixa de kT dessa energia.

De maneira resumida, a função de Fermi vai nos mostrar como será a distribuição dos elétrons, já a derivada da Função de Fermi em relação a energia, nos mostrará a

faixa de energia permitida para a condução dos elétrons.

4.5 Condução nos Circuitos

O circuito anterior mostrou quando temos o equilíbrio da função de Fermi em todos os lugares, no próximo caso vamos ter que os potenciais eletroquímicos não estão em equilíbrio. Isto ocorre quando aplicamos uma diferença de potencial entre os terminais fonte e dreno.

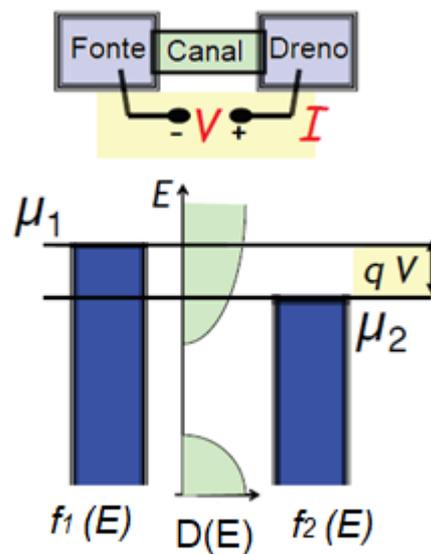


Figura 35: Quando uma voltagem é aplicada sobre os contatos, há um decréscimo do potencial eletroquímico no contato positivo.

Neste caso, teremos que na fonte o potencial eletroquímico é definido por μ_1 , onde mais uma vez, os eletros estão distribuídos preenchendo até seu nível, portanto vamos ter uma função de Fermi para a fonte. Já no dreno temos uma situação semelhante à da fonte, mas quando a ddp é estabelecida ela vai forçar o nível do potencial eletroquímico para baixo, o que vai nos levar a termos um potencial químico diferente definido por μ_2 . Essa diferença nos potenciais μ_1 e μ_2 pode ser definido como qV .

E esta diferença nos potenciais μ_1 e μ_2 é o que faz com que os eletros fluam através do canal, assim como a diferença potencial gravitacional faz um objeto cair, ou a diferença de temperatura entre dos corpos faz o calor fluir. Essa diferença nos potenciais eletroquímicos é o “motor” para a corrente elétrica.

O processo para fazer o a corrente fluir se dá, pois o potencial μ_1 da fonte quer

que os níveis de energia do canal estejam em equilíbrio com o seu potencial, e para se ter esse equilíbrio o contato tenta preencher todos os estados do canal com energia menor do que μ_1 . De maneira simples o contato quer preencher o canal porque sua energia está abaixo de seu potencial eletroquímico.

Em contra partida, o outro contato também deseja entrar em equilíbrio com o canal, mas como a energia está acima de seu potencial μ_2 , devido ao primeiro contato ter preenchido o canal buscando um equilíbrio, ele retira elétrons do canal. O que vai causar um desequilíbrio no primeiro contato, forçando-o a novamente preencher o canal e o ciclo continua, o primeiro contato fornece elétrons e o segundo retira elétrons indefinidamente.

E esse é um dos motivos pelo qual o fluxo de corrente não é provocado campo elétrico, se fosse o caso todos os elétrons deveriam fluir, até os que estão em um nível inferior. Mas por que eles não fluem? Eles não fluem porque os potenciais μ_1 e μ_2 estão acima do nível de energia dos níveis inferiores, e ambos mantêm os estados preenchidos.

Portanto, esse é o real motivo do fluxo de elétrons em um condutor e não pelo campo elétrico.

A partir, daqui podemos fazer uma análise qualitativa do que foi visto para escrever uma expressão para a condutividade elétrica para um resistor elástico [54].

Para esse resistor vamos considerar inicialmente uma pequena faixa de energia DE e pelo que foi visto anteriormente, vamos dizer que a corrente é proporcional à diferença entre as funções de Fermi f_1 e f_2 dos terminais.

$$dI \approx dE[f_1(E) - f_2(E)], \quad (4.22)$$

Se considerarmos pequenas tensões, podemos fazer a seguinte aproximação:

$$f_1(E) - f_2(E) = \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) (\mu_1 - \mu_2), \quad (4.23)$$

mas $(\mu_1 - \mu_2) = qV$

$$f_1(E) - f_2(E) = \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) qV, \quad (4.24)$$

Substituindo o resultado encontrado na eq. 4.22 temos:

$$dI \approx dE \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) qV,$$

$$\frac{dI}{V} \approx dE \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) q. \quad (4.25)$$

Aqui vale notar que a condutância é proporcional a derivada da função de Fermi em relação a energia, e não da própria função de Fermi. Em outras palavras, a condutância ocorre próximo do potencial eletroquímico.

Se quisermos que essa igualdade se torne uma igualdade precisamos inserir uma constante. A constante vai representar a facilidade com que os elétrons possam fluir com determinada energia. Sabemos que o fluxo vai ser estabelecido entre os potenciais μ_1 e μ_2 , se por exemplo, calculado a corrente de um único nível de energia temos que

$$i = \frac{q}{t}, \quad (4.26)$$

onde t representa o tempo para se percorrer todo o canal. Se o resultado for extrapolado para todos os níveis de possível condução podemos escrever a corrente como:

$$i = \frac{q D(E)}{t} \frac{1}{2}. \quad (4.27)$$

Partindo do princípio que o transporte é balístico podemos escrever o tempo como $t = L/v$, onde L é o comprimento do canal, assim

$$i = \frac{q D(E)v}{L} \frac{1}{2}, \quad (4.28)$$

Inserindo a eq. 4.28 em 4.25 e integrando para calcular a condutância total, temos

$$\frac{I}{V} = \int_{-\infty}^{\infty} dE \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) q \frac{q D(E)v}{L} \frac{1}{2},$$

$$\frac{I}{V} = \int_{-\infty}^{\infty} dE \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \frac{D(E)v}{2L} q^2, \quad (4.29)$$

Definindo:

$$\frac{D(E)v}{2L} = \frac{M(E)}{h}, \quad (4.30)$$

onde M é o número de “modos”, que seria o número efetivo de canais permitidos

para a condução e substituindo em 4.29 temos:

$$\frac{I}{V} = \int_{-\infty}^{\infty} dE \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \frac{M(E)}{h} q^2. \quad (4.31)$$

Aqui devemos recordar que o termo $M(E)q^2/h$ já foi definido como a condutância balística G_B , substituindo então em 4.31 temos:

$$\frac{I}{V} = \int_{-\infty}^{\infty} dE \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) G(E), \quad (4.32)$$

$$\text{onde } G(E) = \frac{q^2 D(E)}{2t(E)}. \quad (4.33)$$

Coma as equações 4.32 e 4.33 fechamos o capítulo 4, que era um dos nossos objetivos. Determinar uma equação para condução partindo de uma bordagem clássica para uma abordagem quântica, demonstrando assim essa nova perspectiva que o autor passa em seu livro.

5 Transporte Balístico e Difusivo

Neste capítulo vamos utilizar a eq. 4.33 para analisar alguns conceitos dos transportes balístico e difusivo. Em alguns casos vamos deduzir algumas equações utilizando conceitos já estudados nos capítulos anteriores e vamos também explicar questões que ficaram em aberto.

O processo será realizado em três partes. Na primeira e a segunda, serão analisados os transportes balísticos e difusivo para que na terceira parte, possamos relacionar os dois em um só regime.

Durante o processo, vamos fazer um estudo nos tempos dos transportes balístico e difusivo, para que possam ser inseridos na equação geral da condutância 4.33, resultando assim em uma equação de condutância balística e uma equação de condutância difusiva. Ainda em relação aos tempos, vamos mostrar que o tempo de trânsito para um regime difusivo, pode se relacionar com o tempo de transporte balístico, e mais uma vez vamos inserir esse tempo na equação 4.33 para que assim nos possibilite trabalhar com condutores de 1D, 2D e 3D.

5.1 Tempo de Transporte

Para dar início, vamos analisar separadamente o tempo de transporte de um regime balístico do tempo de transporte de um regime difusivo.

De antemão, podemos dizer que o tempo de transferência de um regime balístico deve ser proporcional ao comprimento L do canal, enquanto o tempo de transferência de um regime difusivo deve ser proporcional a L^2 , como vamos demonstrar a seguir.

5.1.1 Regime balístico

No transporte balístico, sabemos que os elétrons partem da fonte e passam pelo canal sem sofrer desvios até chegar no dreno.



Figura 36: Esquema de transporte balístico em um condutor.

O tempo para que isso ocorra é basicamente o comprimento L do canal dividido pela média da velocidade na direção z .

$$t_B = \frac{L}{\bar{u}}, \quad (5.1)$$

onde

$$t_B = \frac{L}{\bar{u}}. \quad \text{onde } \bar{u} = \langle |v_z| \rangle \quad (5.2)$$

5.1.2 Regime Difusivo

Já o transporte difusivo, requer um pouco mais de cuidado, pois os elétrons agora se chocam ao longo do caminho, levando um pouco mais de tempo ao ser comparado com o tempo de transporte balístico.



Figura 37: Esquema do transporte difusivo em um condutor.

O primeiro passo é tentar identificar o número de elétrons dentro do canal. Para

isso, vamos definir que o número de elétrons por comprimento por energia segue por:

$$\eta = \frac{D}{2L}, \quad (5.3)$$

onde D é a densidade de estados.

Para se calcular então o número de elétrons, que seria a carga Q dentro do canal durante o transporte, basta multiplicar a densidade de elétrons pelo comprimento L do canal. Com isso encontramos que

$$Q = \frac{D}{2}. \quad (5.4)$$

A ideia aqui, é utilizar a famosa equação $Q = I \Delta t$. Então, o próximo passo é determinar a corrente I que passa dentro do canal durante o tempo de transporte.

Para se obter a corrente elétrica dentro do canal vamos invocar a equação da difusão

$$I = -\bar{D} \frac{dn}{dz} = \bar{D} \frac{D}{L^2}, \quad (5.5)$$

onde \bar{D} é o coeficiente de difusão.

Vale destacar que a equação da difusão segue da teoria do Random Walks [55]. Nela ele define o coeficiente de difusão como:

$$\bar{D} = \langle v_z^2 \tau \rangle, \quad (5.6)$$

onde τ é o livre tempo médio

Combinado então os resultados obtidos de Q e I podemos dizer então que o transporte balístico é

$$t_D = \frac{L^2}{2\bar{D}}. \quad (5.7)$$

Com esse último resultado, podemos determinar os tempos de transportes balístico e difusivo.

Determinados os tempos de transporte podemos escrever uma equação geral que abrange tanto o regime balístico e difusivo ao mesmo tempo, essa equação segue a forma

$$t = \frac{L}{\bar{u}} + \frac{L^2}{2\bar{D}}. \quad (5.8)$$

Ou seja, poderíamos dizer que estamos escrevendo uma expressão polinomial do tempo. Com isso esperamos que quando L for muito pequeno, a potência mais baixa domina a equação. E quando o comprimento L for grande a potencia maior vai dominar

a equação. Portanto, a expressão que definimos vai abranger tanto o regime balístico quanto o regime difusivo.

Definidos os tempos de transporte, podemos escrever que o tempo de trânsito t , de um regime difusivo, através de um condutor de comprimento L , pode ser relacionado ao tempo de transporte balístico. Para isso vamos entrar com a eq 5.1 na 5.8

$$t = t_B + t_B \frac{L\bar{u}}{2D},$$

$$t = t_B \left(1 + \frac{L\bar{u}}{2D} \right). \quad (5.9)$$

Se definirmos que $\lambda = 2D/L$, onde λ é o livre caminho médio, temos:

$$t = t_B \left(1 + \frac{L}{\lambda} \right). \quad (5.10)$$

Portanto, a equação 5.10 representa o caso geral que engloba tanto o regime balístico quanto o regime difusivo. Mais uma vez, quando L for pequeno, teremos por predominância o regime balístico e pelo contrário, quando L for grande o regime se trará difusivo.

5.2 Condutância

Até aqui conseguimos encontrar os tempos de transportes balístico e difusivo separadamente, na sequência unimos esses dois tempos para encontrar uma equação que englobava os dois regimes. A partir daqui vamos tomar a equação do tempo balístico, a equação do tempo difusivo e a equação que relaciona os tempos balístico e difusivo, e aplicar na equação geral para condutividade do capítulo anterior, para determinarmos novas equações para condutividade. Obviamente vamos encontrar uma equação que envolva somente o regime balístico, assim como vamos encontrar uma equação que envolva somente o regime difusivo. E por final uma equação que envolva os dois tipos de transporte.

5.2.1 Condutância Balística

Partindo da equação 4.33

$$G = \frac{q^2}{2t} D$$

Vamos inserir a eq. 5.1 na equação 4.33

$$G_B = \frac{q^2 D \bar{u}}{2L}. \quad (5.11)$$

Com isso, o que determinamos foi uma equação para condutância no regime balístico.

Um ponto importante para se notar desse resultado é que a Densidade de estados D , é proporcional ao volume do canal $D \sim AL$. Quando inserimos a eq 5.1 na equação 4.33, acabamos dividindo o volume AL pelo comprimento L , que veio do tempo balístico. Feito isso podemos afirmar que a Condutância balística será proporcional a área A do condutor.

5.2.2 Condutância Difusiva

Seguindo, vamos agora argumentar o caso difusivo, o que será basicamente similar o que foi feito no caso balístico.

Inserindo a eq. 5.7 na equação 4.33

$$G_D = \frac{q^2 D}{L^2} \bar{D}. \quad (5.12)$$

Para esse caso em específico, vamos multiplicar e dividir a equação 5.12 por A .

$$G_D = \frac{A}{L} \frac{q^2 D}{AL} \bar{D}. \quad (5.13)$$

Multiplicar e dividir a eq 5.12 por A , nos permite dizer que a condutância difusiva é proporcional a A/L , enquanto que a balística é proporcional somente a área A . Esse ponto é importante, pois o resultado da eq. 5.13 já era de se esperar quando trabalhamos com condutores longos, onde a condutância é igual a área A dividida pelo comprimento L , multiplicado pela condutividade, e que a partir de 5.13 pode ser definido como

$$\sigma = \frac{q^2 D \bar{D}}{AL}. \quad (5.14)$$

O que modifica a eq 5.13 para:

$$G_D = \frac{A}{L} \sigma. \quad (5.15)$$

Se comparamos com a equação da condutividade de Drude 4.9

$$\sigma = \frac{q^2 n \tau}{m} \quad \text{Eq. da condutividade de Drude}$$

Vemos que a eq. 5.14 é mais geral e também podemos ver como ela é mais simples de se obter pela abordagem que tomamos.

Até esse ponto, indiretamente só consideramos condutores em 3 dimensões, mas podemos aplicar a eq. 5.10 na equação 4.33, para expandir a condutância nas 3 dimensões.

$$t = t_B \left(1 + \frac{L}{\lambda} \right) = t_B \left(\frac{\lambda + L}{\lambda} \right),$$

$$G = \frac{q^2 D \lambda}{2 t_B (\lambda + L)}, \quad (5.16)$$

Da eq. 4.33 temos que:

$$G_B = \frac{q^2 D}{2 t_B}, \quad (5.17)$$

Substituindo 5.17 em 5.16 concluímos que

$$G = \frac{G_B \lambda}{\lambda + L}. \quad (5.18)$$

Podemos ainda escrever que $\sigma A = G_B \lambda$, e substituindo em 5.18 assim

$$G = \frac{\sigma A}{\lambda + L}. \quad (5.19)$$

Nesse caso particular, a equação 5.19 pode ser identificada como a condutância para um condutor de 3 dimensões. Observe que se o condutor for muito longo, L se sobressai em relação a λ e caso o contrário, se o condutor for pequeno o termo de λ que vai predominar.

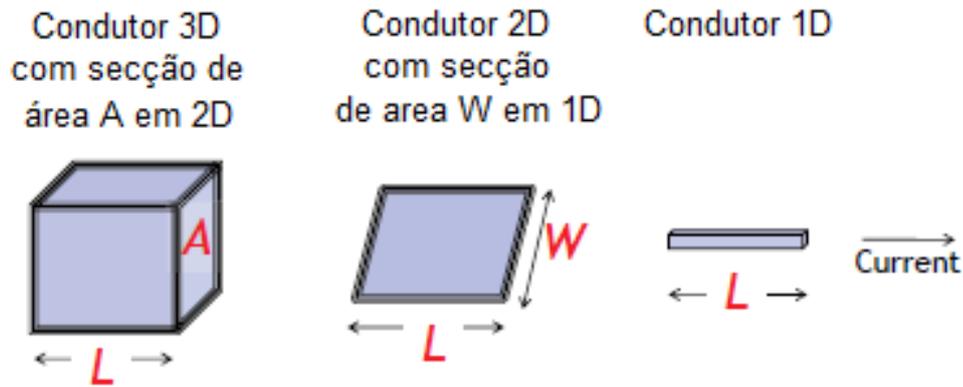


Figura 38: Condutores de 3D, 2D e 1D

Para o caso em que o condutor é bidimensional, podemos escrever que

$$G = \frac{\sigma W}{\lambda + L}, \quad (5.20)$$

onde

$$\sigma W = G_B \lambda. \quad (5.21)$$

E para o caso onde o condutor é unidimensional temos

$$G = \frac{\sigma}{\lambda + L}, \quad (5.22)$$

onde

$$\sigma = G_B \lambda. \quad (5.23)$$

A partir desses resultados podemos escrevê-los em uma forma mais compacta:

$$G = \frac{\sigma}{\lambda + L}(1, W, A), \quad (5.24)$$

onde

$$\sigma = G_B \lambda \left(1, \frac{1}{W}, \frac{1}{A}\right). \quad (5.25)$$

Os itens que estão entre os parenteses representam as dimensões 1D, 2D e 3D respectivamente, dos condutores.

Se compararmos a eq.5.24 com a lei de Ohm padrão, para o caso também das 3 dimensões

$$G = \frac{\sigma}{\lambda}(1, W, A), \quad (5.26)$$

podemos dizer que quando o comprimento se torna muito pequeno tendendo a zero, a

resistência não tende a zero e a condutância não tende ao infinito, O que é justamente o que a lei de ohm padrão diz. O que de fato ocorre para condutores muito pequenos, é que há uma resistência mínima, que vai depender da interface do canal. A eq 5.24 nos mostra isso, por mais que o canal seja pequeno ainda assim haverá um comprimento λ que nos fornecera alguma resistência.

5.3 Média angular de \bar{D} e \bar{u}

Na parte anterior introduzimos as dimensões nos canais de condução, podemos agora continuar com esse processo para as duas grandezas também apresentadas anteriormente que são \bar{u} e \bar{D} . Além das duas grandezas, também definimos λ . Em ambos os casos nós usamos $\langle \rangle$ para destacar que estamos trabalhando com a média da distribuição angular de u e D, que será relacionado com as dimensionalidades dos condutores.

Temos que:

$$\bar{u} = \langle |v_z| \rangle \quad \text{e} \quad \bar{D} = \langle v_z^2 \tau \rangle$$

Para 1D

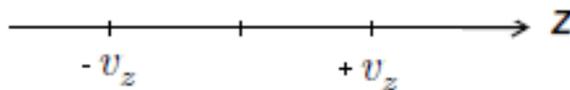


Figura 39: Média angular de \bar{D} e \bar{u} para 1D

Cada elétron vai possuir apenas um valor para a velocidade, que está atrelado ao valor da energia daquele elétron. Essa velocidade pode ser $+v_z$ ou $-v_z$. O valor médio que \bar{u} pode assumir então será $+v_z$ ou $-v_z$. Portanto podemos dizer que o valor médio de u é simplesmente

$$\bar{u} = v. \quad (5.27)$$

Para o coeficiente de difusão segue a mesma ideia

$$\bar{D} = v^2 \tau. \quad (5.28)$$

Substituindo \bar{u} e \bar{D} na equação do livre caminho médio $\lambda = 2\bar{D}/L$ temos

$$\lambda = 2v\tau, \quad (5.29)$$

neste caso λ vai representar o livre caminho médio para o retro espalhamento.

Para o caso em $2D$

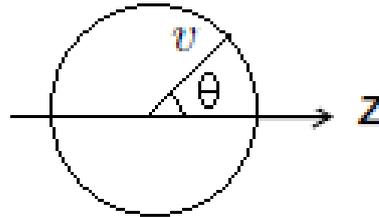


Figura 40: Média angular de \bar{D} e \bar{u} para $2D$

No caso de $2D$, temos o eixo z que representa o caminho entre a fonte e o dreno, já a velocidade do elétron pode estar em qualquer direção. Portanto, pode estar em qualquer ângulo θ .

Para calcular a velocidade temos que

$$\bar{v} = \frac{\int_{-\pi}^{\pi} d\theta |v \cos \theta|}{\int_{-\pi}^{\pi} d\theta}. \quad (5.30)$$

Nesse ponto podemos mudar os integrandos cara se calcular somente a parte positiva.

$$\bar{v} = v \frac{2 \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\theta \cos \theta}{2 \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\theta} = \frac{2v}{\pi}; \quad (5.31)$$

$$\bar{v} = \frac{2v}{\pi}. \quad (5.32)$$

Portanto, se estivermos em um condutor de duas dimensões devemos usar esse valor pra a média da velocidade.

Em relação ao coeficiente de difusão temos

$$\bar{D} = \langle v^2 \tau \rangle,$$

$$\bar{D} = \langle v^2 \cos^2 \theta \tau \rangle, \quad (5.33)$$

$$\bar{D} = v^2 \tau \frac{\int_0^{2\pi} d\theta \cos^2 \theta}{\int_0^{2\pi} d\theta} = \frac{v^2 \tau}{2}, \quad (5.34)$$

$$\bar{D} = \frac{v^2 \tau}{2}. \quad (5.35)$$

Para o caso em 3D

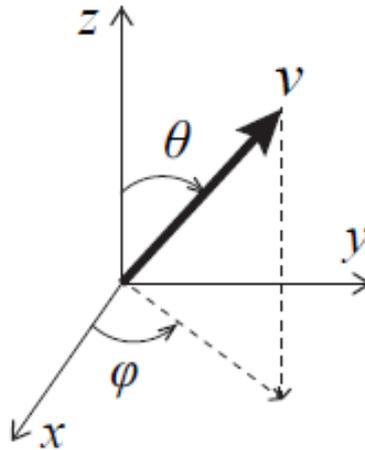


Figura 41: Média angular de \bar{D} e \bar{u} para 3D.

No caso de 3 dimensões vamos ter 2 ângulos, um em relação ao eixo z, que é definido por θ , e outro que é o ângulo ϕ entre a projeção do vetor velocidade no plano xy, com o eixo x. Portanto, com esses dois ângulos é possível definir uma direção específica em 3D.

Para a velocidade temos:

$$\bar{v} = \frac{\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} d\theta \sin \theta |v \cos \theta|}{\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} d\theta \sin \theta}. \quad (5.36)$$

Aqui mais uma vez vamos modificar os integrandos para que só as partes positivas sejam calculada, já que estamos trabalhando com o valor absoluto da velocidade.

$$\bar{v} = v \frac{\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi/2} d\theta \sin \theta \cos \theta}{\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi/2} d\theta \sin \theta}, \quad (5.37)$$

$$\bar{v} = \frac{v}{2}. \quad (5.38)$$

Para o coeficiente de difusão temos

$$\bar{D} = v^2 \tau \frac{\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi/2} d\theta \sin \theta \cos^2 \theta}{\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi/2} d\theta \sin \theta}, \quad (5.39)$$

$$\bar{D} = \frac{v^2 \tau}{3}, \quad (5.40)$$

colocando todos esses resultados juntos temos

$$\bar{u} : \langle |v_Z| \rangle = v \left(1, \frac{2}{\pi}, \frac{1}{2} \right); \quad (5.41)$$

$$\bar{D} : \langle v_z^2 \tau \rangle = v^2 \tau \left(1, \frac{1}{2}, \frac{1}{3} \right); \quad (5.42)$$

$$\lambda = \frac{2\bar{D}}{L} = v\tau \left(2, \frac{\pi}{2}, \frac{4}{3} \right). \quad (5.43)$$

Se quisermos ir mais além combinando a equação 5.41 com a 5.11 para obter:

$$G_B = \frac{q^2 D v}{2L} \left(1, \frac{2}{\pi}, \frac{1}{2} \right). \quad (5.44)$$

Mais uma vez, podemos notar que a condutância balística depende de D/L , e como a densidade de estados é proporcional ao volume do condutor, a condutância balística continua sendo proporcional a área A do canal.

Essa relação da condutância balística com a área A foi observada por volta de 1969 e foi denominada de Resistência de Sharvin [56], que pode ser representada pelo gráfico da figura 42.

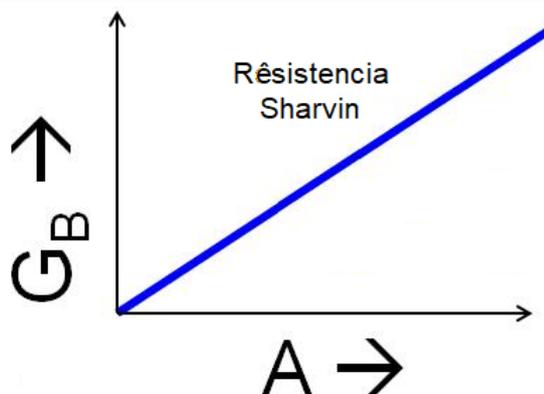


Figura 42: O gráfico mostra que a condutância balística é linear com a área do condutor.

O ponto importante desse resultado, é que a condutividade balística é independente do comprimento L do condutor, ou seja, se eu dobrar o comprimento a condutividade permanecerá a mesma.

Entretanto, aproximadamente 20 anos depois, experimentos mostraram que para pequenos condutores a condutância não era proporcional a área A , ou seja, o gráfico não era linear, em vez disso se a condutância era proporcional a múltiplos inteiros, chamados de quantum de condutância.

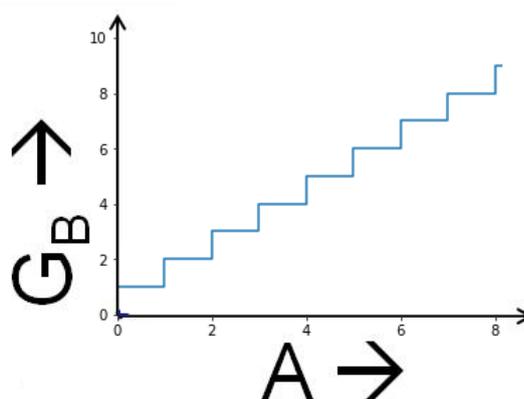


Figura 43: Experimentos demonstraram que a condutância não era linear, era proporcional a múltiplos inteiros.

Para exemplificar isso melhor, vamos imaginar um condutor de $1D$.

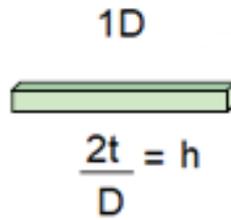


Figura 44: Condutor de $1D$.

Determinou-se através de experimentos que a constante de Planck era numericamente igual a razão do dobro do tempo de transporte, pela sua densidade de estados D .

$$h = \frac{2t}{D}, \quad (5.45)$$

se esse termo for aplicado na equação da condução balística 5.17 e for feitas algumas manipulações, obtemos

$$G_B = \frac{q^2}{h}, \quad (5.46)$$

se podemos interpretar um condutor $3D$ como se fosse uma coleção de condutores de $1D$ em paralelo, a Condutância balística seria o quantum da condutância vezes o número M inteiros desses condutores de $1D$.

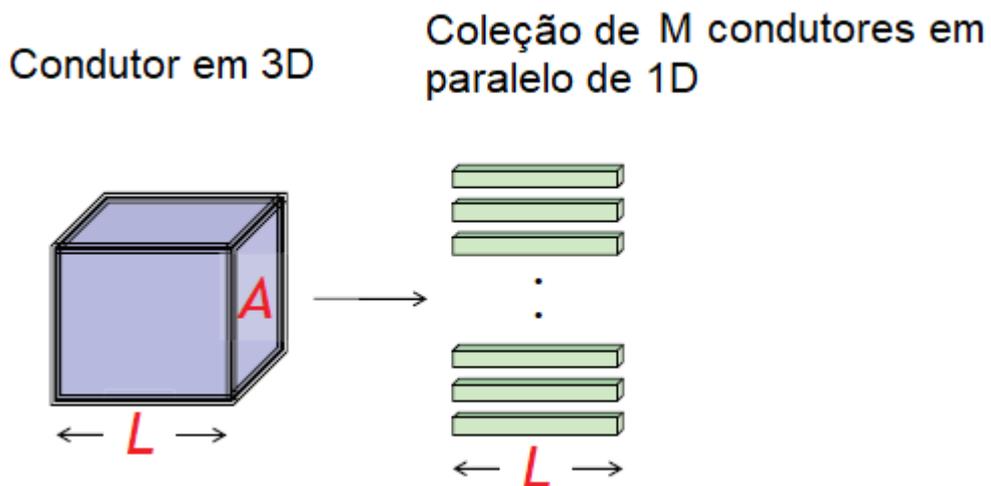


Figura 45: Representação de M canais de condução de $1D$ equivalentes à um condutor de $3D$.

$$G_B = \frac{q^2}{h} \times M. \quad (5.47)$$

A eq. 5.47 nos mostra que não poderíamos tratar o elétron como uma partícula clássica, pois seu resultado envolve a constante de Planck, além do fato de que usamos a estatística de Fermi para deduzir alguns resultados.

Portanto, esse resultado é exatamente o que mostram os experimentos realizados em pequenos condutores, ou seja, podemos dizer que um condutor de $2D$ ou de $3D$, nada mais é do que uma coleção de pequenos canais que estão preenchendo todo o volume ou área do condutor. A representação de M seria basicamente uma medida do número de canais de condução, a qual se poderia ser somados para encontrar a eq. 5.44.

6 *Conclusão*

Este trabalho apresentou uma revisão teórica sobre a nova perspectiva do transporte eletrônico em condutores em nanoescala. Nos primeiros capítulos abordamos alguns conceitos que foram úteis no desenvolvimento do objetivo principal. Explicitamos no capítulo 3 os conceitos fundamentais do comportamento análogo de um gás ideal com a corrente elétrica, para que posteriormente fosse aplicada no modelo de condução de Drude. O qual identificamos um comportamento clássico para a condução. O modelo de Drude ainda teve outra contribuição, que foi tentar encontrar um modelo quântico. Ainda no capítulo 3 discutimos sobre a distribuição de Fermi-Dirac, que foi essencial para explicar no capítulo 4, um conceito diferente para fluxo de elétrons em um condutor.

A proposta do capítulo 4, foi realizar a análises dos transistores e já dar início à transição para a nanoescala. Em certa parte, nos questionamos o que aconteceria se o comprimento de um condutor apresentasse as dimensões do livre caminho médio, impulsionado o desenvolvimento das condutâncias balísticas e difusivas dos condutores, bem como qual era de fato o papel da resistência em um condutor. Uma vez que nosso conhecimento da resistência elétrica é oriunda do choque com a rede cristalina do material. Logo em seguida, definimos as propriedades dos resistores elásticos para que de fato começássemos as análises da condução nos circuitos.

Por fim, no capítulo 5, calculamos o tempo de transporte para os regimes balísticos e difusivo, para serem inseridos na equação da condutância 4.33, que posteriormente se transformou na equação 5.44, que poderia ser aplicada nos condutores de uma, duas e três dimensões. Sobre o fato de obtermos uma condutância balística, equação 5.47, conclui-se que ela pode ser interpretada como uma ferramenta para se demonstrar a equação 5.44. No entanto essa não foi a proposta do trabalho em si, embora isso seja possível.

Referências Bibliográficas

- [1] <https://www.genealogy.math.ndsu.nodak.edu/id.php?id=91222>
- [2] Feynman, R. (1992). There's plenty of room at the bottom [data storage]. *Journal of Microelectromechanical Systems*, 1, 60-66.
- [3] Feynman, R.P. 1984. *Tiny Machines* (videotape of 25 October 1984). Mill Valley CA: Sound Photosynthesis.
- [4] Kogan, Herman (1958). *The Great EB: The Story of the Encyclopædia Britannica*. Chicago: The University of Chicago Press.
- [5] *From Nobel Lectures, Physics 1942-1962*, Elsevier Publishing Company, Amsterdam, 1964.
- [6] <https://www.shmj.or.jp/english/pioneers/pnr23.html>
- [7] <https://prabook.com/web/sakuji.komagata/3716906>
- [8] Doran J.; Bizony P. *Starman: The Truth behind the Legend of Yuri Gagarin*. New York: Walker and Company, 2011.
- [9] S. F. Danko, W. L. Doxey and J. P. McNaul, "The Micro-Module: A Logical Approach to Microminiaturization," in *Proceedings of the IRE*, vol. 47, no. 5, pp. 894-903, May 1959.
- [10] Hall, Eldon C. (1996). *Journey to the Moon: The History of the Apollo Guidance Computer*. Reston, Virginia, USA: American Institute of Aeronautics and Astronautics. p. 196.
- [11] Faggin, F. "The Birth of the Microprocessor". *Byte*, pp. 145–150, March 1992.
- [12] Moore, Gordon E. *Cramming more components onto integrated circuits* (World Scientific) 1965.
- [13] Durant, Will. *A filosofia de Aristóteles*; Editora Tecnoprint S. A. p. 68.

[14] RUSSELL, BERTRAND. A History of Western Philosophy, Simon Schuster, 1972.

[15] Oki, Maria da Conceição Marinho (2009). Controvérsias sobre o atomismo no século XIX. *Química Nova*, 32(4), 1072–1082.

[16] Dalton, 1805 apud Leicester, H. M.; Klickstein, H. S.; A source book in chemistry 1400-1900, McGraw-Hill Books Company: New York, 1952, p. 211

[17] Viana H. E. B.; Porto P. A. The Development of Dalton's Atomic Theory as a Case Study in the History of Science: Reflections for Educators in Chemistry. *Sci Educ*, 2010 .

[18] Frank A. J. L. James, 'Faraday, Michael (1791–1867)', *Oxford Dictionary of National Biography*, Oxford University Press, Sept 2004.

[19] Dyer, B., Thorpe, T. E., Harker, J. A., Simmonds, C., Perkin, F. M. (1920). Obituary notices: Sir William Crookes, O.M., 1832–1919; Thomas Fairley, 1843–1919; Walter William Fisher, 1842–1920; Antoine Paul Nicolas Franchimont, 1844–1919; Harold Cecil Greenwood, 1887–1919; Charles Edward Groves, 1841–1920; John Holmes, 1871–1919; Sir Boverton Redwood, Bart., 1846–1919; John Charles Umney, 1868–1919. *J. Chem. Soc., Trans.*, 117(0), 444–472.

[20] KIWANGA, Christopher Amelye. Christopher Amelye. KIWANGA, ed. Física Nuclear. Introdução à Física Nuclear. 1 ed. Reino Unido, 2013.

[21] CONN, G. K. T. TURNER, H. D. The evolution of the nuclear atom. Londres: Iliffe Books. 1965.

[22] CARUSO, F. OGURI, V. Física moderna: origens clássicas e fundamentos quânticos. Rio de Janeiro: Elsevier. 2006.

[23] E. Rutherford, The scattering of α and β particles by matter and the structure of the atom, *Phil. Mag.* 21, 669-688 (1911).

[24] Corrêa, C. (2014), *Revista de Ciência Elementar*, 2(02).

[25] SARDELLA, Antônio; MATEUS, Edegar; Curso de Química: química geral, Ed. Ática, São Paulo/SP – 1995.

[26] Neils Bohr – Biographical. NobelPrize.org. Nobel Media AB 2020. Sat. 26 Dec 2020.

- [27] Eisberg, R.; Resnick, R. Física Quântica (Editora Campus Ltda., Rio de Janeiro, 1979), translated from Quantum Physics. 1974.
- [28] Suto, Koshun. (2020). Relativistic Correction of the Rydberg Formula. Journal of Modern Physics. 11. 294-303. 10.4236/jmp.2020.112018. .
- [29] Valverde, C., Baseia, B., Bagnato, V. S. (2016). Mecanismos de alargamento de linhas espectrais atômicas. Revista Brasileira de Ensino de Física, 38(4).
- [30] Skoog, Douglas; West, Donald; Holler, F. James; Crouch, Stanley (2006). Fundamentos de Química Analítica 8 ed. [S.l.]: Thomson. p. 670, 674.
- [31] Moore, W.J., Physical Chemistry, 4ª Edição, Longmans.
- [32] Russel, J.B., Química Geral, 2a Edição, Volume 1, Makron Bools, 1994.
- [33] Griffiths, David J. (2004). Introduction to Quantum Mechanics (2nd ed.).
- [34] Braga, J. P.; Os cem anos do átomo de Sommerfeld. Revista Brasileira de Ensino de Física, vol. 38, nº 4, e4306, 2016.
- [35] Tipler, P.A., Física Moderna, Guanabara Dois, 1981.
- [36] Grad, Harold (1949), "On the Kinetic Theory of Rarefied Gases.", Communications on Pure and Applied Mathematics.
- [37] Lopes W.; Constante de Boltzmann. Revista Brasileira de Ensino de Física, v. 32, n. 3, 3308; 2010.
- [38] Soto R. - (Oxford Master Series in Physics), Kinetic Theory and Transport Phenomena Oxford University, 2016.
- [39] Brown, Robert A Brief Account of the Microscopical Observations made in the months of June and July of 1827, on the particles contained in the Pollen of Plants and On the General Existence of Active Molecules in organic and inorganic bodies . Edinburgh new Philosophical Journal.
- [40] Lucretius The Way Things Are: The De Rerum Natura, translation by Rolfe Humphries, Indiana University Press 1968.
- [41] Jan Ingenhousz, Experiments upon Vegetables, Discovering Their great Power of purifying the Common Air in the Sun-shine, and of Injuring it in the Shade and at Night. To Which is Joined, A new Method of examining the accurate Degree of Salubrity

of the Atmosphere, Londres, 1779. Por Henry Marshall Leicester and Herbert S. Klickstein, A Source Book in Chemistry 1400-1900, New York, NY: McGraw Hill, 1952.

[42] Pais, Abraham SUBTLE is the LORD. The Science and Life of Albert Einstein. Oxford, University Press, 2nd Edition, 2005.

[43] Brown, Robert A Brief Account of the Microscopical Observations made in the months of June and July of 1827, on the particles contained in the Pollen of Plants and On the General Existence of Active Molecules in organic and inorganic bodies. Edinburgh new Philosophical Journal (pp. 358-371, July-September, 1828).

[44] Hoffmann, D. (2006). Paul Drude (1863–1906). Annalen Der Physik, 15(7-8), 449–460.

[45] Rodrigues, V.; Bagnato, V.S. Análogo mecânico para condutividade elétrica dos metais: Efeito da temperatura. Revista Brasileira de Ensino de Física, v. 28, n. 1, p. 35 - 39, (2006).

[46] Pérez, C. O MODELO DO ELÉTRON LIVRE DE DRUDE COMPLETA 100 ANOS. Cad.Cat.Ens.Fís., v.17, n.3: p.348-359, dez.2000.

[47] Campbell L.; The Life of James Clerk Maxwell, Ripol Classic, 1884

[48] Flamm, D. (1983). Ludwig Boltzmann and his influence on science. Studies in History and Philosophy of Science Part A, 14(4), 255–278.

[49] Sears, Francis; Salinger, Gerhard (1979). Termodinâmica, Teoria Cinética e Termodinâmica Estatística 3 ed. Rio de Janeiro: Guanabara Dois.

[50] Steven H. Simon-The Oxford Solid State Basics, Oxford University Press (2013).

[51]Datta, S.;Lessons from Nanoelectronics: A New Perspective on Transport, World Scientific Publishing Co Pte Ltd; 2nd Edition (May 22, 2018)

[52]McLennan, M. J., Lee, Y., Datta, S. (1991). Voltage drop in mesoscopic systems: A numerical study using a quantum kinetic equation. Physical Review B, 43(17), 13846–13884.

[53]Bennett, C.; Landauer, R. (1985). The Fundamental Physical Limits of Computation. Scientific American, 253(1), 48-57.

[54] Imry, Y.; Amir, A.; (2010) 50 years of Anderson Localization, ed. E. Abrahams, Chapter 9, The Localization Transition at Finite Temperatures: Electric and Thermal

Transport.

[55] Berg, H. Random Walks, Princeton University. Sep, 1993.

[56] Jong, M. Transition from Sharvin to Drude resistance in high-mobility wires. Phys. Rev. B 49, 7778 – Mar. 1994.