

TE814-Comunicações Ópticas I

DISPOSITIVOS FOTÔNICOS: PARTE 1

PROF. CÉSAR AUGUSTO DARTORA - UFPR

E-MAIL: CADARTORA@ELETRICA.UFPR.BR

CURITIBA-PR

Roteiro da Aula:

- Fotônica: Conceitos Básicos
- Fundamentos de Mecânica Quântica
- Noções de Teoria do Estado Sólido

Fotônica: Conceitos Básicos

↪ Dispositivos Fotônicos são aqueles para os quais não é mais possível tratar o campo eletromagnético do ponto de vista puramente ondulatório.

↪ Efeitos quânticos que surgem na interação entre a luz e a matéria trazem à tona o aspecto corpuscular da radiação e faz-se necessária a introdução do conceito de fóton.

↪ Os principais dispositivos a serem estudados são:

- Fontes de Luz: Lasers e Fontes Térmicas;
- Amplificadores Ópticos;
- Fotodetectores.

↪ O que é um fóton?

→ É o quantum de energia do campo eletromagnético para uma dada frequência $\omega = 2\pi f$. Representa um grão de mínima energia do campo. A energia contida no campo eletromagnético não pode assumir qualquer valor mas sim múltiplos inteiros de uma certa quantidade básica - o quantum de energia.

$$E_{ph} = hf = \hbar\omega . \quad (1)$$

onde h é a constante de Planck.

$$h = 6.626 \times 10^{-34} J.s \quad , \quad \hbar = \frac{h}{2\pi}.$$

Usualmente lidamos com um número tão grande de fótons, com energia por fóton tão pequena que é possível tratar o campo como um "fluido" contínuo - Equações de Maxwell clássicas. O caráter discreto da luz não é perceptível e vemos a emergência apenas do aspecto ondulatório.

→ Na interação com a matéria, onde a transição entre níveis eletrônicos requer energias da ordem de um único fóton, esse aspecto corpuscular emerge.

↪ Apenas para dar um exemplo, na transmissão de 1W de potência na frequência de 1GHz, cada fóton tem energia de:

$$E_{ph} = hf = 6.626 \times 10^{-34} \times 10^9 = 6.626 \times 10^{-25} \text{J} = 4.14 \mu\text{eV}.$$

Em um tempo de 1s a energia média emitida pelo transmissor corresponde a:

$$E_t = P \times \Delta t = 1\text{W} \times 1\text{s} = 1\text{J}.$$

O número de fótons correspondente será de

$$n = \frac{E_t}{E_{ph}} = 1.5 \times 10^{24} \text{fotons}.$$

↪ Se assumirmos a fonte $P_0 = 1\text{W}$ isotrópica, então a $r = 1\text{km}$ da fonte, para uma área de recepção $A_r = 1\text{m}^2$ teremos:

$$E_r = \frac{P_0}{4\pi r^2} \times \Delta t \times A_r = \frac{1\text{W}}{4\pi(1000\text{m})^2} \times 1\text{s} \times 1\text{m}^2 = 79.5\text{nW}.$$

$$n = 1.2 \times 10^{17} \text{fotons}.$$

↪ Nesse caso, podemos negligenciar os efeitos da quantização.

↪ No infravermelho próximo ao visível e no espectro visível, a frequência está na faixa de $10^{14} - 10^{15}$ Hz e a energia por fóton corresponderá a:

$$E_{ph} = hf \sim 0.4 - 4eV .$$

Para termos uma idéia, os níveis de energia do átomo de hidrogênio tem energia dada por:

$$E_H(n) = -\frac{13.6}{n^2}eV ,$$

onde $n = 1, 2, 3, \dots$ é um número inteiro que indica o número quântico principal e a energia de ionização é 13.6eV.

A transição do estado $1s$ para um nível $2p$ por exemplo tem energia estimada por:

$$\Delta E = E_H(2) - E_H(1) = 13.6(1 - 1/4) = 10.2eV .$$

Esta energia pode ser providenciada por um único fóton, no espectro do ultravioleta.

~> Em átomos com mais de uma camada eletrônica, as energias de ionização são muito menores, pois estas últimas camadas estão mais fracamente ligadas ao átomo e fótons no espectro visível já podem ter energia suficiente para produzir excitação de níveis superiores ou para ionizar o átomo.

~> Por outro lado, em átomos, moléculas ou cristais existem ressonâncias vibracionais, rotacionais, etc, cujo espectro de absorção está no infravermelho, microondas etc.

Fazem parte de uma noção introdutória da Fotônica os seguintes tópicos:

- Noções de Mecânica Quântica: Equação de Schroedinger, Níveis de Energia do Átomo, Bandas de Energia dos Sólidos, Estatística Quântica: bósons e férmions, Interação da Luz com a Matéria.
- Princípios de Funcionamento de Lasers: Tipos de Lasers, A Física Envolvida, Equações de Taxa
- Fontes Térmicas.
- Amplificadores Ópticos: Princípios Físicos, A Fibra dopada com Érbio, Ruidos: ASE, etc;
- Fotodetectores: Princípios de Funcionamento, Tipos de Fotodetectores, Eficiência Quântica e Fontes de Ruído
- Tópicos Especiais (opcional): Quantização do Campo Eletromagnético, Equações de Maxwell-Bloch...

Fundamentos de Mecânica Quântica

Objetivo: apresentar os conceitos fundamentais da Mecânica Quântica.

Principais Acontecimentos Históricos:

- 1900- Max Planck e a radiação do corpo negro - conceito de quantum e a constante h .
- 1905- Einstein e o Efeito Fotoelétrico: surge o conceito de fóton.
- 1908- Einstein e Debye - calor específico de alguns sólidos - fônons.
- 1913- Modelo Atômico de Bohr - regras de quantização de Bohr-Sommerfeld.
- Anos 1920- de Broglie e a dualidade onda-partícula. Desenvolvimento formal da Mecânica Quântica por Schroedinger, Max Born, Heisenberg, Wolfgang Pauli, Paul Dirac, etc. Escola de Coppenhagen e a interpretação probabilística.

→ Na Mecânica Clássica as grandezas físicas que podem ser observadas, como energia E , posição \mathbf{x} , momento linear \mathbf{p} , momento angular \mathbf{J} , campo elétrico \mathbf{E} , campo magnético \mathbf{H} , etc, são funções reais do espaço-tempo. Em geral assumem espectro contínuo, como energia, momento linear, etc.

→ Na Mecânica Quântica, cada uma dessas grandezas físicas deve ser substituída por um operador hermitiano (uma matriz, tal que $H = H^\dagger$), cujos autovalores são reais e cada autovalor representa um dos possíveis resultados das medidas físicas daquele operador. É importante notar que a dimensionalidade do operador pode ser infinita. Por exemplo, o operador posição \mathbf{x} .

→ O princípio de correspondência associado ao chamado Teorema de Ehrenfest diz que no limite $h \rightarrow 0$, os valores médios de qualquer operador quântico satisfazem as equações de movimento clássicas. No caso de $h \rightarrow 0$ e em baixas velocidades, a mecânica quântica fica reduzida às Leis de Newton da Mecânica Clássica.

POSTULADO FUNDAMENTAL: Um sistema físico qualquer é descrito por uma função de estado ψ , correspondente a um raio no espaço de Hilbert.

- i) Espaço de Hilbert: é um espaço vetorial normado (com produto interno) complexo de dimensão N . A dimensão pode ir até infinito, sendo constituída de uma parcela discreta e uma parcela contínua de vetores, dependendo dos graus de liberdade de interesse do sistema.

- ii) Raio é um vetor cuja magnitude não é relevante, e sim sua direção e sentido. Vetores paralelos com diferentes magnitudes correspondem ao mesmo raio. Conforme veremos, na Mecânica Quântica adota-se a interpretação probabilística de Copenhague e então os vetores representando os estados físicos devem ser normalizados.

Notação de Dirac:

- Espaço dos Kets: Kets são vetores coluna com a seguinte notação:

$$|a\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ a_N \end{pmatrix}$$

É óbvio nesse caso que o espaço de Hilbert possui dimensão N e portanto N vetores da forma acima.

- Espaço dos Bras: são vetores duais aos kets, ou seja, são vetores linha com a seguinte notação:

$$\langle a| = (|a\rangle)^\dagger = (a_1^* \ a_2^* \ \dots \ a_N^*)$$

O símbolo \dagger corresponde à transposição e conjugação complexa enquanto que $*$ corresponde à conjugação complexa.

- O produto interno entre dois vetores quaisquer é dado por uma expressão denominada bra(c)ket. Dados dois vetores a e b , o produto interno é expresso na forma:

$$(a, b) = \langle a | \cdot | b \rangle = \langle a | b \rangle .$$

Essa notação simplifica bastante várias expressões.

Completeza e Ortonormalidade dos Estados no Espaço de Hilbert

No espaço de Hilbert podemos definir uma base de vetores $\{|\alpha\rangle\} = (|1\rangle, |2\rangle \dots |N\rangle)$ num espaço de Hilbert de dimensão N , satisfazendo uma condição de norma:

$$\langle\alpha|\beta\rangle = \delta_{\alpha\beta} , \quad (2)$$

$$\sum_{\alpha} |\alpha\rangle\langle\alpha| = \mathbf{1}_{N \times N} , \quad (3)$$

\rightsquigarrow $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$ são dois kets pertencentes à mesma base ortonormalizada.

\rightsquigarrow $\delta_{\alpha\beta}$ é função delta de Kronecker, ou seja:

$$\delta_{\alpha\beta} = \begin{cases} 1 & \alpha = \beta \\ 0 & \alpha \neq \beta \end{cases}$$

Completeza: A soma de todos os produtos tensoriais da forma $|\alpha\rangle\langle\alpha|$ deve ser igual à matriz identidade de ordem N , sendo N a dimensionalidade do espaço.

$$\sum_{\alpha} |\alpha\rangle\langle\alpha| = \mathbf{1}_{N \times N}$$

No caso de espaços de dimensão infinita com espectro contínuo a função delta de Kronecker deve ser substituída pela função delta de Dirac e a soma sobre α deve ser substituída pelo símbolo de integração.

Qualquer estado físico $|\psi\rangle$ pode ser expandido em uma base completa que cumpre com as condições (2) e (3) (assim como qualquer vetor do espaço \mathfrak{R}^3 pode ser expandido na base ortonormalizada cartesiana):

$$|\psi\rangle = \sum_{\alpha} c_{\alpha} |\alpha\rangle, \quad (4)$$

onde c_{α} são coeficientes complexos.

2º Postulado: Interpretação Probabilística da Mecânica Quântica (devida a Max Born)

Dado um estado físico na forma (4) a probabilidade de que o sistema seja encontrado em um estado específico $|\alpha\rangle$ será dada por:

$$P = |\langle\alpha|\psi\rangle|^2 = |c_\alpha|^2 . \quad (5)$$

Da teoria das probabilidades, $0 \leq P \leq 1$. Nesse caso a probabilidade de encontrar o sistema no estado $|\psi\rangle$ dado que o sistema encontra-se no estado $|\psi\rangle$ deve ser unitária, ou seja:

$$|\langle\psi|\psi\rangle|^2 = 1 \quad (6)$$

que corresponde à normalização do ket $|\psi\rangle$.

Da definição (6) veja que:

$$|\langle \Psi | \Psi \rangle|^2 = \left(\sum_{\beta} \langle \beta | c_{\beta}^* \right) \left(\sum_{\alpha} c_{\alpha} | \alpha \rangle \right) = \sum_{\alpha} \sum_{\beta} c_{\beta}^* c_{\alpha} \langle \beta | \alpha \rangle = \sum_{\alpha} \sum_{\beta} c_{\beta}^* c_{\alpha} \delta_{\alpha\beta} = \sum_{\alpha} c_{\alpha}^* c_{\alpha} = 1 ,$$

ou seja, uma vez que $c_{\alpha}^* c_{\alpha} = |c_{\alpha}|^2$

$$\sum_{\alpha} |c_{\alpha}|^2 = 1 . \quad (7)$$

3º Postulado: Observáveis Físicos

Todo observável físico é representado por um operador hermitiano cujos auto-valores são reais. Um operador pode ser representado por uma matriz. São observáveis a posição \mathbf{x} , o tempo t , a energia E , momento linear \mathbf{p} e momento angular \mathbf{J} , dentre outros.

Para um observável A cumpre-se a relação

$$\hat{A} = \hat{A}^\dagger . \quad (8)$$

A relação acima implica que os autovalores de \hat{A} são reais. Podemos determinar todos os autovetores e autovalores de \hat{A} :

$$\det(\hat{A} - \lambda \mathbf{1}) = 0 , \quad (9)$$

que dará todos os autovalores λ de \hat{A} e

$$\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle , \quad (10)$$

sendo a um autovalor e $|a\rangle$ um autovetor da matriz \hat{A} .

Qualquer operador pode ser expandido em uma base completa:

$$\hat{A} = \mathbf{1}\hat{A}\mathbf{1} = \sum_{\alpha} |\alpha\rangle\langle\alpha|\hat{A} \sum_{\beta} |\beta\rangle\langle\beta| = \sum_{\alpha,\beta} |\alpha\rangle\langle\alpha|\hat{A}|\beta\rangle\langle\beta| .$$

Utilizando as propriedades de produtos matriciais, temos

$$\hat{A} = \sum_{\alpha,\beta} |\alpha\rangle\langle\alpha|\hat{A}|\beta\rangle\langle\beta| = \sum_{\alpha,\beta} |\alpha\rangle(\langle\alpha|\hat{A}|\beta\rangle)\langle\beta| .$$

Note que $\langle\alpha|\hat{A}|\beta\rangle$ é um escalar e nesse caso:

$$\hat{A} = \sum_{\alpha,\beta} \langle\alpha|\hat{A}|\beta\rangle |\alpha\rangle\langle\beta| = \sum_{\alpha,\beta} A_{\alpha\beta} |\alpha\rangle\langle\beta| , \quad (11)$$

ou seja, o elemento $A_{\alpha\beta}$ da matriz \hat{A} na base especificada é dado por:

$$A_{\alpha\beta} = \langle\alpha|\hat{A}|\beta\rangle .$$

4º Postulado: A equação de Schroedinger

Dado o operador hamiltoniano \hat{H} , cujos autovalores correspondem às autoenergias de um sistema físico, a evolução temporal de um estado físico qualquer $|\psi\rangle$ será dada pela equação de Schroedinger, mostrada abaixo:

$$\hat{H}|\psi\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle . \quad (12)$$

Se $|\psi\rangle$ é um auto-estado de \hat{H} , então

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle , \quad (13)$$

onde E é a energia correspondente ao estado $|\psi\rangle$. Substituindo na equação (12) temos:

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle ,$$

e resolvendo a equação diferencial, tem-se:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}|\psi(0)\rangle , \quad (14)$$

↪ Para um auto-estado de \hat{H} a evolução temporal apenas acrescenta uma fase à função $|\psi\rangle$ inicial, preservando a propabilidade de encontrar o sistema no estado físico $|\psi\rangle$.

5º Postulado: Colapso da Função de Ondas

Dado $|\psi\rangle$ que não é um auto-estado de um certo observável \hat{A} , a realização de uma medida daquele observável dará como resultado um dos auto-estados do operador correspondente \hat{A} , com certa probabilidade de ocorrência.

\rightsquigarrow Uma nova medida do observável somente irá confirmar o resultado da primeira medida, pois diz-se que o estado físico $|\psi\rangle$ colapsou para um dos possíveis auto-estados do operador \hat{A} .

O valor médio das medidas do observável \hat{A} sobre muitos ensembles preparados no mesmo estado inicial $|\psi\rangle$ será dada por:

$$\langle A \rangle_{\psi} = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle , \quad (15)$$

entretanto uma medida específica de \hat{A} somente poderá fornecer um dos auto-valores de \hat{A} , com certa probabilidade.

O processo de medida e colapso é esquematizado abaixo.

Dado o estado $|\psi\rangle$, que pode ser expandido na base que diagonaliza o operador \hat{A} , na primeira medida, $|\psi\rangle$ colapsa para um dos estados $|a\rangle$ com probabilidade $|c_a|^2$.

$$|\psi\rangle = \sum_{a'} c_{a'} |a'\rangle \rightarrow \hat{A}|\psi\rangle \rightarrow |a\rangle \text{ com Prob. } |c_a|^2$$

Uma vez realizada a medida, nas próximas medidas do operador \hat{A} , o sistema já estará em um auto-estado de \hat{A} . Nesse caso, esse auto-estado apenas será confirmado com 100% de probabilidade. Esse procedimento também denomina-se preparação de um estado.

Operadores Compatíveis

São dois observáveis \hat{A} e \hat{B} , para os quais a medida de um não altera a medida do outro, ou em outras palavras, possuem os mesmos auto-vetores. A base que diagonaliza o operador \hat{A} também diagonaliza \hat{B} , então

$$\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle \quad e \quad \hat{B}|a\rangle = b_a|a\rangle$$

onde b_a corresponde ao autovalor do operador \hat{B} correspondente ao autoestado $|a\rangle$.

Nesse caso é fácil mostrar que:

$$\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$$

Vamos realizar algumas definições:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} , \quad (16)$$

$$\{\hat{A}, \hat{B}\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} , \quad (17)$$

$$(18)$$

(16) é denominado comutador de \hat{A} e \hat{B} enquanto (17) é denominado anti-comutador.

Para dois observáveis compatíveis:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0$$

enquanto que observáveis incompatíveis não comutam, ou seja:

$$[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$$

↪ Uma vez que todos os auto-estados de um sistema evoluem de acordo com a equação de Schroedinger dependente do tempo, serão conservadas todas as grandezas que comutam com o Hamiltoniano do sistema:

$$[\hat{A}, \hat{H}] = 0 .$$

Transformações de Base

Dadas duas bases de kets ortonormalizadas que denotaremos por $\{|\alpha_i\rangle\} = \{|\alpha_1\rangle, |\alpha_2\rangle \dots |\alpha_N\rangle\}$ e $\{|\beta_i\rangle\} = \{|\beta_1\rangle, |\beta_2\rangle \dots |\beta_N\rangle\}$ podemos converter uma base na outra, utilizando a completeza:

$$|\beta_i\rangle = \mathbf{1}|\beta_i\rangle = \sum_j |\alpha_j\rangle \langle \alpha_j | \beta_i \rangle = \sum_j (\langle \alpha_j | \beta_i \rangle) |\alpha_j\rangle ,$$

ou seja,

$$|\beta_i\rangle = \sum_j C_{\alpha_j \beta_i} |\alpha_j\rangle , \quad (19)$$

$$C_{\alpha_j \beta_i} = \langle \alpha_j | \beta_i \rangle . \quad (20)$$

É possível portanto encontrar os coeficientes de expansão de uma base para a outra através do produto interno.

O Princípio de Incerteza

O princípio de incerteza foi demonstrado primeiramente por Heisenberg e há duas maneiras de interpretar.

1 - Teoria das Transformadas de Fourier

É uma forma de compreender a famosa dualidade onda-partícula através da teoria de transformadas de Fourier, onde espaço e momento linear, tempo e energia estão em espaços recíprocos. São espaços duais:

$$\text{tempo } t \leftrightarrow \text{Energia (ou frequencia) } E = \hbar\omega ,$$

$$\text{posicao } \mathbf{x} \leftrightarrow \text{momento linear(ou vetor de onda) } \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} .$$

De um ponto de vista de transformações de base, podemos expressar uma função de ondas no domínio (\mathbf{x}, t) ou no domínio (\mathbf{p}, E) para significar o mesmo estado físico. Apenas estaríamos expandindo o estado físico em bases distintas, com uma regra específica de transformação. Vejamos que dado o estado físico $|\psi\rangle$, podemos fazer:

$$\psi(\mathbf{p}) = \langle \mathbf{p} | \psi \rangle , \quad (21)$$

$$\psi(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | \psi \rangle . \quad (22)$$

Como a posição é uma variável contínua, assim como o momento linear, a completeza é expressa na forma:

$$\sum_{\mathbf{x}} |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}| \rightarrow \int d^3 \mathbf{x} |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}|$$

e podemos então expressar (21) na base $|\mathbf{x}\rangle$:

$$\psi(\mathbf{p}) = \langle \mathbf{p} | \psi \rangle = \langle \mathbf{p} | \mathbf{1} | \psi \rangle = \int d^3 \mathbf{x} \langle \mathbf{p} | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | \psi \rangle \quad (23)$$

O mesmo vale para:

$$\psi(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | \psi \rangle = \langle \mathbf{x} | \mathbf{1} | \psi \rangle = \int d^3 \mathbf{p} \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | \psi \rangle \quad (24)$$

identificando \mathbf{x} e \mathbf{p} em espaços duais e as equações acima correspondentes a pares de transf. de Fourier:

$$\langle \mathbf{p} | \mathbf{x} \rangle = (\langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle)^* = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp \left[\frac{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}}{\hbar} \right] \quad (25)$$

Da teoria de transf. de Fourier: se a largura espacial de $\psi(\mathbf{x})$ com relação ao eixo x vale Δx e a largura no espaço de momento de $\psi(\mathbf{p})$ com relação ao eixo p_x corresponde a Δp_x então:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (26)$$

Interpretação: dada uma medida de posição e momento em uma determinada direção, à uma incerteza na medida da posição, Δx , deve corresponder uma incerteza no momento linear, Δp_x , cujo produto é da ordem da constante de Planck. Portanto posição e momento linear são incompatíveis, quanto maior a precisão na determinação de um, maior será a imprecisão quanto ao valor do outro;

- Uma onda plana é completamente caracterizada por energia e momento linear. Dessa forma seriam conhecidos ($E = \hbar\omega, \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$). Como a onda plana se estende por todo o espaço a incerteza quanto à posição de uma partícula cujo momento e energia são perfeitamente determinados vai para infinito;

- Uma partícula localizada no espaço a um dado instante de tempo é caracterizada por uma função delta de Dirac, $\delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0(t))$ e corresponde portanto à uma incerteza total do seu momento e energia, uma vez que para compor a função delta, o espectro de energia e momento não é localizado.

2 - Utilizando Operadores e a Álgebra de Matrizes

Consideremos dois operadores quaisquer \hat{A} e \hat{B} , tal que o desvio da média é dado por:

$$\Delta A = \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle , \quad (27)$$

$$\Delta B = \hat{B} - \langle \hat{B} \rangle , \quad (28)$$

onde é fácil ver que $\langle \Delta \hat{A} \rangle = 0$, todavia $\langle (\Delta \hat{A})^2 \rangle \neq 0$, resultados conhecidos da estatística.

É possível ainda escrever a seguinte relação:

$$\hat{A}\hat{B} = \frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2}\{\hat{A}, \hat{B}\} , \quad (29)$$

onde usamos o comutador e anti-comutador dos operadores. Das noções de estatística, vale lembrar ainda que $|\langle \hat{A}^2 \rangle| \geq |\langle \hat{A} \rangle|^2$ e além disso:

$$\Delta\hat{A} \cdot \Delta\hat{B} = \frac{1}{2}[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}] + \frac{1}{2}\{\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\} = \frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2}\{\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\} . \quad (30)$$

Utilizando a desigualdade de Schwarz dos valores médios, temos:

$$\langle (\Delta \hat{A})^2 \rangle \cdot \langle (\Delta \hat{B})^2 \rangle \geq |\langle \Delta \hat{A} \cdot \Delta \hat{B} \rangle|^2$$

de onde é fácil mostrar que:

$$\langle (\Delta \hat{A})^2 \rangle \cdot \langle (\Delta \hat{B})^2 \rangle \geq \frac{1}{4} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|^2 . \quad (31)$$

As seguintes relações são denominadas relações de comutação canônicas:

$$[x_i, x_j] = 0 , \quad (32)$$

$$[p_i, p_j] = 0 , \quad (33)$$

$$[x_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij} , \quad (34)$$

onde x_i e $p_i = -i\hbar \partial / \partial x_i$ são operadores de posição e momento, respectivamente, δ_{ij} é a função delta de Kronecker e então, utilizando (31) é fácil ver que:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} .$$

1 A Equação de Pauli-Schroedinger Não-Relativística

Consideremos a função hamiltoniana de uma partícula livre não-relativística:

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m},$$

e adotemos a prescrição da mecânica quântica, onde substituimos o momento linear \mathbf{p} pela forma de um operador diferencial na forma:

$$\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$$

e utilizando a eq. de Schroedinger

$$\hat{H}\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$$

obtemos a equação

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}, \quad (35)$$

A solução é da forma:

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \psi_0 e^{-i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{x})} . \quad (36)$$

Observe que $\hbar\omega = E$ é a energia da partícula, o que nos permite escrever a equação de Schroedinger independente do tempo:

$$H\psi(\mathbf{x}) = E\psi(\mathbf{x}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}\psi(\mathbf{x}) .$$

Desta última obtemos a relação energia-momento para uma partícula não-relativística livre, na forma:

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} , \quad (37)$$

onde $k = |\mathbf{k}|$. Esta é a relação de dispersão de uma partícula não-relativística livre.

Observe ainda que a partícula livre é bem caracterizada pela sua energia $E = \hbar\omega$ e momento linear $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$, cuja solução é a onda plana (36). Dessa forma a incerteza de posição é total, pelas relações de incerteza.

Para uma partícula de carga elétrica q e spin $1/2$ na presença do campo eletromagnético representado pelos potenciais (ϕ, \mathbf{A}) a equação de Schroedinger deve levar em conta as interações:

$$\hat{H}\psi = \left[\frac{1}{2m}(\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2 + q\phi - \mu_B \vec{\sigma} \cdot \mathbf{B} \right] \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}, \quad (38)$$

onde $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ são as matrizes de Pauli, dadas abaixo

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (39)$$

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad (40)$$

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (41)$$

$\mu_B = q\hbar/2m$ é o magneton de Bohr, sempre lembrando que $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ é um operador diferencial e em geral na mecânica quântica $\mathbf{A} \cdot \mathbf{p} \neq \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}$, a menos que $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$.

↪ A função de onda $\psi(\mathbf{x}, t)$ é denominada spinor de Pauli, e tem duas componentes no espaço de spin, correspondendo aos autovalores possíveis das matrizes de Pauli, $\sigma = \pm 1$. É convencional adotar o eixo z como eixo de quantização do spin.

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_{\uparrow} \\ \Psi_{\downarrow} \end{pmatrix},$$

$$\sigma_z \Psi_{\uparrow} = \Psi_{\uparrow}, \quad \sigma_z \Psi_{\downarrow} = -\Psi_{\downarrow}$$

Em uma primeira aproximação, para determinar a estrutura eletrônica de átomos, negligenciam-se o potencial vetor \mathbf{A} e o spin, considerando-se apenas o potencial eletrostático de Coulomb.

A equação de Schroedinger independente do tempo para uma partícula de carga q , massa m na presença do potencial elétrico ϕ fica dada na forma abaixo:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + q\phi \right] \Psi = E\Psi. \quad (42)$$

↪ A última equação permite determinar as soluções ψ e as energias correspondentes para os átomos de número atômico Z com um único elétron $q = -e$, dado o potencial da forma

$$\phi = \frac{Ze}{4\pi\epsilon_0 r} .$$

↪ A solução de orbitais ligados deve-se considerar a condição $\psi(r \rightarrow \infty) \rightarrow 0$. Na verdade a equação acima permite a solução dos níveis de energia do átomo de hidrogênio e a obtenção dos orbitais eletrônicos para outros átomos, contendo apenas um elétron.

↪ A inclusão de todos os Z elétrons para um átomo eletricamente neutro perturba os níveis de energia, mas as soluções verdadeiras são obtidas a partir dessas soluções particulares.

Noções da Teoria do Estado Sólido

Os tópicos mais relevantes, dos quais alguns serão tratados aqui são:

- i) Átomos, Moléculas e Ligações Químicas;
- ii) Simetrias e Grupos Cristalinos;
- iii) Teorema de Bloch e estruturas de bandas;
- iv) Excitações Elementares nos sólidos: fônons, mágnons, polarons, plasmons, etc;
- v) Condutores, Isolantes e Semi-Condutores;
- vi) Transições de Fase.

Tentaremos dar uma noção geral de como partimos da teoria dos níveis de energia atômicos para obter a estrutura de bandas dos materiais.

Átomos, Moléculas e Estrutura de Bandas dos Sólidos

↪ Átomo: menor porção da matéria capaz de conservar as propriedades essenciais de um determinado material.

↪ O arranjo dos vários átomos e moléculas em um sólido introduz graus de liberdade. Fenômenos coletivos aparecem.

O átomo é um arranjo de partículas tal que:

- O núcleo constitui-se de prótons e nêutrons, correspondendo a quase toda a massa do átomo. O número de massa corresponde à soma do número de prótons e nêutrons do átomo. Uma vez que a massa total é aproximadamente a massa do núcleo, e para primeira aproximação a massa de prótons e nêutrons é praticamente a mesma, a massa atômica é o produto do número de massa pela massa de um próton, aproximadamente;
- a eletrosfera é o nicho dos elétrons, que ocupam órbitas bem definidas ao redor do núcleo. Em um átomo eletricamente neutro o número de elétrons e prótons é o mesmo.

~> Embora o núcleo possua uma estrutura de níveis de energia, ditada pelas forças eletromagnéticas e pelas interações de origem nuclear denominadas interações fortes capazes de manter coesas as partículas que compõem o núcleo, em energias ordinárias o núcleo encontra-se no estado fundamental, ou seja, de mais baixa energia possível e praticamente todas as propriedades da matéria serão ditadas pelo número de cargas no núcleo e pelas camadas eletrônicas.

~> Número Atômico Z : é o número de cargas de um átomo.

~> Indo um pouco além: são as camadas eletrônicas mais externas, denominadas camadas de valência, aquelas que irão determinar as principais propriedades físico-químicas dos materiais.

~> Elétrons nas camadas mais internas e completas são denominados elétrons de caroço e em condições normais interagem muito menos do que aqueles nas camadas de valência. Os efeitos nucleares são um ramo de estudos denominado Física Nuclear, que não nos interessa aqui.

↪ A estrutura atômica é determinada pela solução da equação de Pauli-Schroedinger, levando em conta os vários efeitos de spin, spin-órbita, etc.

↪ O átomo mais simples é o Hidrogênio, que possui um único próton e um único elétron. Somente para este é conhecida a solução exata da equação de Schroedinger.

Negligenciando os efeitos de spin-órbita para um átomo qualquer de número atômico Z , na ausência de campo magnético externo, temos:

$$\hat{H} = \hat{H}_N + \sum_{i=1}^Z \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} - \sum_{i=1}^Z \frac{Z|q|^2}{4\pi\epsilon_0|\mathbf{x}_i|} + \frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{|q|^2}{4\pi\epsilon_0|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|}, \quad (43)$$

$$\hat{H}_N = \sum_{j=1}^{Z+N} \frac{\mathbf{P}_j^2}{2M} + U_N(p, n), \quad (44)$$

sendo N o número de nêutrons, \hat{H}_N o hamiltoniano do núcleo e $U_N(p, n)$ um termo de energia potencial bastante complexo que depende de interações fortes e eletromagnéticas entre prótons e nêutrons.

Em geral é possível fatorizar a função de ondas na forma de um produto:

$$\Psi_A = \Psi \otimes \Psi_N ,$$

de tal forma que:

$$\hat{H}_N \Psi_N = E_N \Psi_N ,$$

resumindo o problema à solução de:

$$\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^Z \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} - \sum_{i=1}^Z \frac{Z|q|^2}{4\pi\epsilon_0|\mathbf{x}_i|} + \frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{|q|^2}{4\pi\epsilon_0|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|} , \quad (45)$$

$$\hat{H}_0 \Psi = E \Psi . \quad (46)$$

No Hamiltoniano \hat{H}_0 a interpretação dos termos é a seguinte:

- O primeiro termo corresponde à energia cinética dos elétrons;
- O segundo termo é a energia de interação dos elétrons com o potencial elétrico criado pelo núcleo, correspondendo à uma atração coulombiana;
- O último termo é a repulsão coulombiana entre pares de elétrons.

Existem vários métodos de solução do problema descrito acima, cabendo destacar dois muito conhecidos na literatura corrente: o Método de Hartree e o Método de Hartree-Fock. A diferença básica é que o Método de Hartree-Fock leva em conta a anti-simetria das funções de ondas de férmions.

Podemos considerar como primeira aproximação átomos ionizados de tal forma que apenas um único elétron esteja presente. Nesse caso o problema a ser resolvido será:

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{Zq^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \psi(r, \theta, \varphi, \sigma) = E\psi(r, \theta, \varphi, \sigma) , \quad (47)$$

onde σ denota o grau de liberdade de spin.

Note que para a função ψ existem 4 coordenadas independentes, $\mathbf{x} = (r, \theta, \varphi)$ e o spin σ que para os elétrons pode ser $\sigma = +1$ ou $\sigma = -1$, correspondente aos autovalores da matriz de Pauli σ_z .

Impondo as seguintes condições:

$$\psi(r \rightarrow \infty) \rightarrow 0 ,$$

$$\int_V \psi^\dagger \psi dV = 1 ,$$

permite encontrar as seguintes soluções:

$$\Psi_{nlm\sigma}(r, \theta, \varphi, \sigma) = P_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \chi_\sigma , \quad (48)$$

onde $P_{nl}(r)$ são polinômios radiais determinados a partir das funções de Laguerre, $Y_l^m(\theta, \varphi)$ são as harmônicas esféricas e χ_σ é um spinor de Pauli definido anteriormente.

Note que existem quatro números quânticos.

- O número quântico n é dito número principal e refere-se à camada de energia e a proximidade em relação ao núcleo. Quanto menor o número n mais próximo o orbital estará do núcleo. Pode assumir somente valores inteiros $n = 1, 2, 3, 4, \dots$;
- O número quântico l determina o momento angular e é denominado número quântico azimutal, assumindo os valores $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$. Existe ainda a nomenclatura s, p, d, f, \dots correspondendo aos valores $0, 1, 2, 3, \dots$, respectivamente. Determina a forma dos orbitais;
- O número quântico m corresponde à projeção do momento angular sobre o eixo de referência z . Uma vez que o momento angular é quantizado m somente pode assumir valores inteiros na forma $m = -l, -l + 1, \dots, 0, \dots, l - 1, l$. É denominado também número quântico magnético, pois o momento angular orbital está associado ao momento de dipolo magnético orbital e nesse caso a aplicação do campo magnético externo modifica as energias de acordo com o valor de m ;
- O número σ corresponde ao spin, e para partículas de spin $1/2$ somente pode assumir dois valores, $\sigma = \pm 1$ para os autovalores de σ_z (ou de acordo com a notação $\pm 1/2$.)

Uma vez conhecidos todos os orbitais $\Psi_{nlm\sigma}(r, \theta, \varphi, \sigma)$ para um dado átomo de número atômico Z , é possível ir preenchendo os orbitais de 1 até Z elétrons, e ir recalculando as energias do átomo até finalizar o processo. Em geral valem algumas regras empíricas para o preenchimento dos orbitais:

- Princípio de Exclusão de Pauli: elétrons são férmions, e nesse caso não podem dois elétrons ocupar o mesmo orbital (não podem ter os quatro números quânticos iguais). Assim determina-se que para $n = 1$, $l = 0$ e $m = 0$ obrigatoriamente e ficamos então com o máximo de 2 elétrons, correspondendo às duas possibilidades de spin;
- Regra de Hund: o estado fundamental de um átomo maximiza o momento angular de spin, e adota o valor de momento angular orbital compatível com a maximização do momento angular de spin total. Esse procedimento simetriza a parte do spin e anti-simetriza a parte espacial da função de ondas, fazendo com que os elétrons tenham probabilidades maiores de estarem mais distantes, o que minimiza a repulsão coulombiana. ;
- Diagramas de Linus Pauling: concebido pelo famoso químico, permite determinar através de uma forma diagramática o estado fundamental dos átomos.

São características fundamentais dos átomos:

i) os níveis de energia atômicos são discretos;

ii) a inclusão de interações adicionais remove algumas simetrias e consequentemente a degenerescência do espectro. Observe que simetria implica mais de um estado físico com a mesma energia, e quanto maior a simetria maior a degenerescência, portanto.

↪ A aplicação do campo magnético, por exemplo, pela interação de Zeeman,

$$H_{Zeeman} = -\mu_B \vec{\sigma} \cdot \mathbf{B} ,$$

remove a degenerescência de momento magnético de spin, ou seja um elétron de spin up terá energia diferente de um elétron de spin down no mesmo orbital.

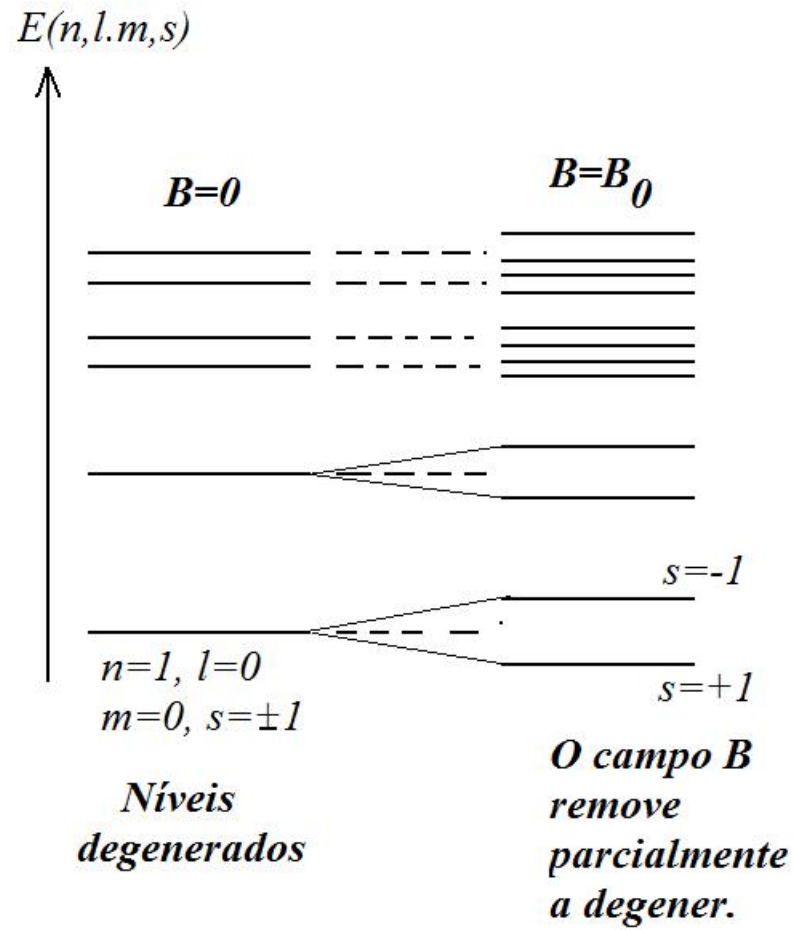


Figure 1: Desdobramento de níveis de energia atômicos.

Moléculas: são arranjos de uns poucos átomos, embora algumas moléculas possam ser formadas por dezenas de átomos.

↪ Em geral as moléculas tem simetria menor do que os átomos individuais que a formam. Nesse caso, haverá desdobramento de níveis de energia, pela quebra de simetria. Outra forma de entender o desdobramento é a presença de novas interações.

↪ Vamos ver o que acontece quando aproximamos dois átomos através de um modelo bastante simplista, mas que permite entender qualitativamente um fenômeno bastante importante.

Consideremos dois átomos idênticos A e B , cuja energia individual é dada por ε , que inicialmente estão muito distantes. Nessa configuração a energia total do sistema seria 2ε , uma vez que para $r \rightarrow \infty$ a interação entre os átomos A e B é tão pequena que pode ser desprezada.

À medida em que aproximamos os dois átomos a energia de interação entre ambos deve aumentar progressivamente. Denominemos tal energia de interação simplesmente Δ .

Podemos propor uma Hamiltoniana para o sistema, na forma:

$$\hat{H} = \hat{H}_A + \hat{H}_B + \hat{H}_{AB} , \quad (49)$$

tal que na ausência de interação $\hat{H}_{AB} \rightarrow 0$ e as soluções do sistema não sofrem perturbações, ou seja, teríamos as seguintes equações:

$$\hat{H}_A \psi_A(\mathbf{x}_1) = \varepsilon \psi_A(\mathbf{x}_1)$$

$$\hat{H}_B \psi_B(\mathbf{x}_2) = \varepsilon \psi_B(\mathbf{x}_2)$$

Se $\hat{H}_{AB} \rightarrow 0$ então \hat{H} é diagonal na base $\{|\psi_A\rangle, |\psi_B\rangle\}$.

À medida que os átomos se aproximam a interação \hat{H}_{AB} aumenta, produzindo uma mistura dos orbitais ψ_A e ψ_B . Em forma matricial podemos escrever:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \varepsilon & -\Delta \\ -\Delta & \varepsilon \end{pmatrix} , \quad (50)$$

sendo questão trivial diagonalizar a hamiltoniana acima, propondo a solução da forma:

$$|\psi\rangle = A|\psi_A\rangle + B|\psi_B\rangle ,$$

Determinando os autovalores de \hat{H} e os autovetores temos:

$$|\psi_{-}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_A\rangle + |\psi_B\rangle) \text{ para } E_{-} = \varepsilon - \Delta, \quad (51)$$

$$|\psi_{+}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_A\rangle - |\psi_B\rangle) \text{ para } E_{+} = \varepsilon + \Delta, \quad (52)$$

→ Considerando-se dois elétrons, inicialmente um em cada átomo, quando $\Delta \rightarrow 0$ e a distância é muito grande, a energia conjunta dos dois átomos soma 2ε .

→ Aproximando os átomos, os dois elétrons podem ocupar o orbital denominado orbital ligante $|\psi_{-}\rangle$, que tem a menor energia, com spins contrários obviamente. A energia da molécula passa a ser $E = 2E_{-} = 2\varepsilon - 2\Delta$.

→ Nesse caso a formação da molécula é energeticamente favorável em relação aos dois átomos separados. É claro que existe uma distância ótima para a qual a energia se reduz. Aproximando mais, a energia deve aumentar devido a efeitos de repulsão de Coulomb.

→ O outro orbital $|\psi_+\rangle$ tem energia $\varepsilon + \Delta$ e é dito orbital anti-ligante pois tem energia maior do que o orbital atômico dos dois átomos distantes, não favorecendo a ligação.

→ Observe que um fenômeno importante acontece quando fazemos dois átomos interagir para formar uma molécula: O nível de energia atômico ε se desdobra em dois níveis $\varepsilon \pm \Delta$, separados por uma distância 2Δ , sendo Δ a energia de interação.

→ Obviamente que a simetria em uma molécula é menor do que a simetria do átomo e por consequência disso degenerescências são removidas.

→ Quando levamos em conta mais orbitais na ligação molecular, ou mesmo, quando mais de dois átomos participam, ocorre o desdobramento de um único nível de energia atômico em vários níveis energéticos moleculares.

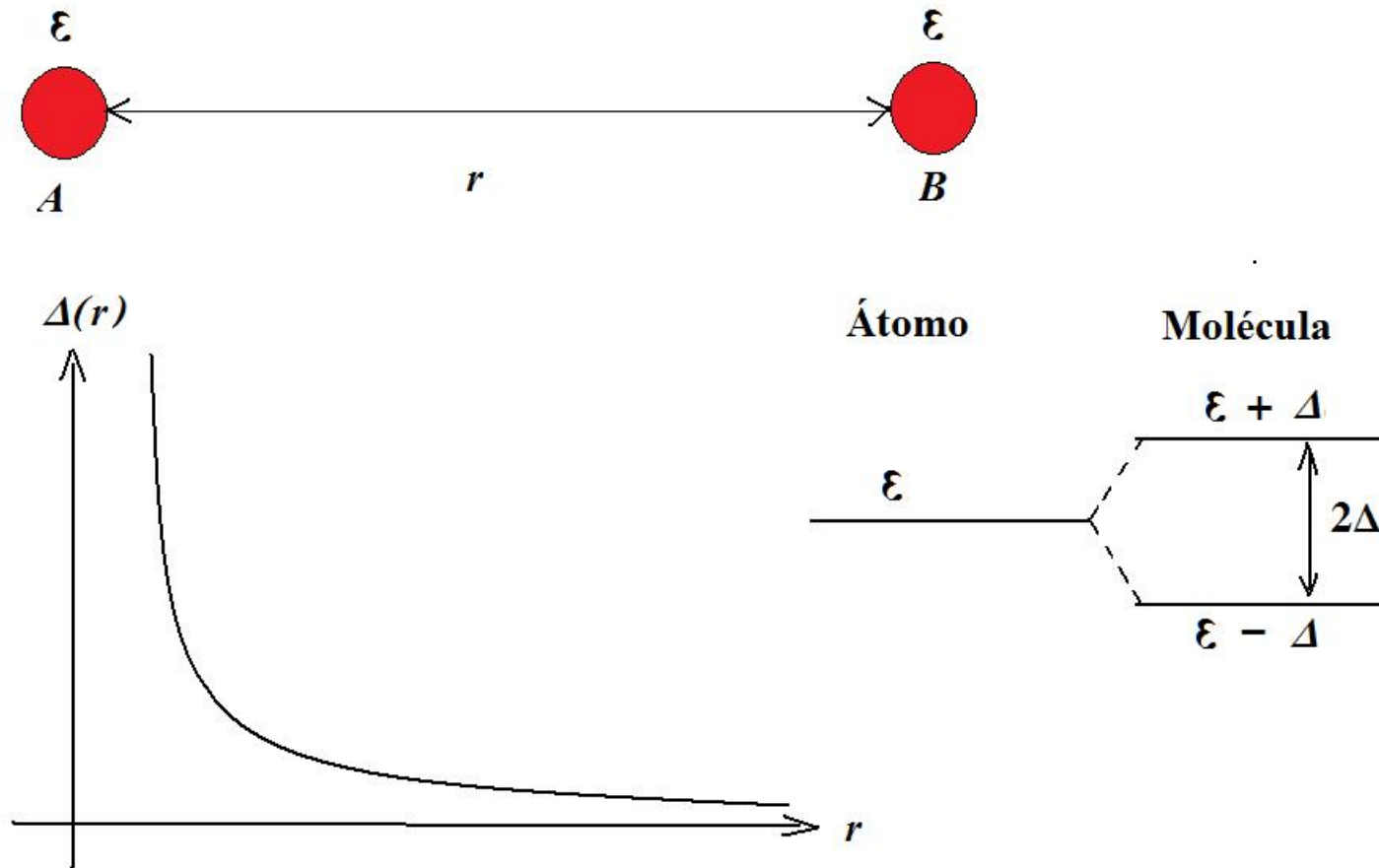


Figure 2: Níveis de Energia Molecular devido à Interação Átomo-Átomo.

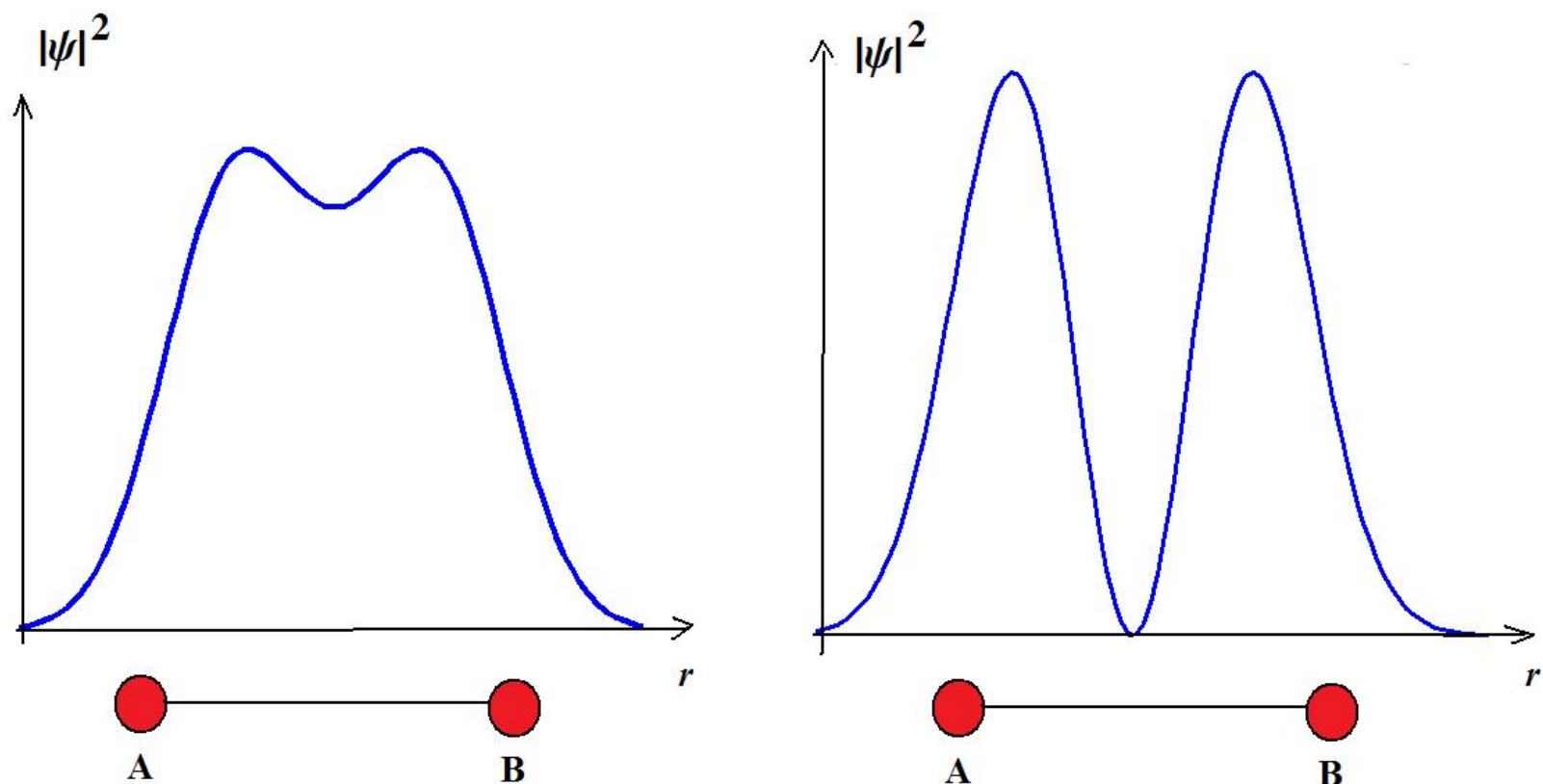


Figure 3: Funções Moleculares Ligante e Anti-Ligante. Observe que os elétrons tendem a ficar entre os átomos A e B no orbital ligante, enquanto ficam cada um em seu átomo no orbital anti-ligante. No orbital ligante os spins são anti-alinhados.

~> Podemos separar as ligações químicas basicamente em:

→ Ligações covalentes,

→ Ligações iônicas,

→ Ligações de van der Waals.

No caso acima foi considerada a ligação covalente, que ocorre quando os átomos que a formam tem a mesma estrutura na camada de valência, favorecendo uma distribuição mais homogênea das cargas.

~> Se as últimas camadas dos átomos interagentes tem diferentes números de elétrons, pode ser que os elétrons que participem da ligação tenham tendência a se aproximar de um dos átomos, gerando a ligação denominada iônica.

~> As ligações de van der Waals estão relacionadas a gases nobres.

~> As propriedades dos sólidos são ditadas em grau elevado pela forma como os átomos e moléculas que o formam fazem suas ligações.

→ Regra do Octeto: todos os átomos tem a tendência a completar as suas últimas camadas eletrônicas de modo a que os momentos de dipolo elétrico e magnético total sejam minimizados, reduzindo assim a energia total da estrutura.

↪ Os metais são caracterizados por camadas eletrônicas mais externas com número de elétrons ≤ 3 , e portanto para completar essas últimas camadas, vários átomos devem compartilhar a ligação, tornando assim os elétrons praticamente deslocalizados dentro da molécula, i.e., a ligação metálica é uma ligação covalente com participação de muitos átomos, fazendo com que os elétrons de valência fiquem deslocalizados, formando assim a denominada banda de condução, formada por elétrons quase livres.

↪ Os isolantes são geralmente formados por elementos com número de elétrons ≥ 5 e um pequeno número de átomos participa da ligação para dar estabilidade ao sistema físico, fazendo com que os elétrons fiquem localizados numa região delimitada por poucos átomos. Elétrons localizados são menos aptos a se mover, reduzindo propriedades como a condutividade elétrica, por exemplo.

↪ Já os semicondutores encontram-se numa situação intermediária, onde o número de elétrons de valência é igual a 4.

↪ Generalizando: o que deve ocorrer em um sólido em termos de níveis de energia?

→ Os níveis atômicos começam a se desdobrar e quando o número de átomos é muito grande, dizemos no limite em que $N \rightarrow \infty$, cada nível de energia desdobra-se em um espectro contínuo em torno do nível original.

↪ Níveis atômicos antes discretos agora assumem caráter contínuo e alguns níveis que antes estavam separados agora podem passar a se superpor. Diz-se então que formou-se uma estrutura de bandas.

↪ É claro que os níveis de energia de elétrons de caroço não são profundamente alterados, continuam sendo discretos ou formam bandas muito estreitas, com energias muito abaixo do último nível ocupado.

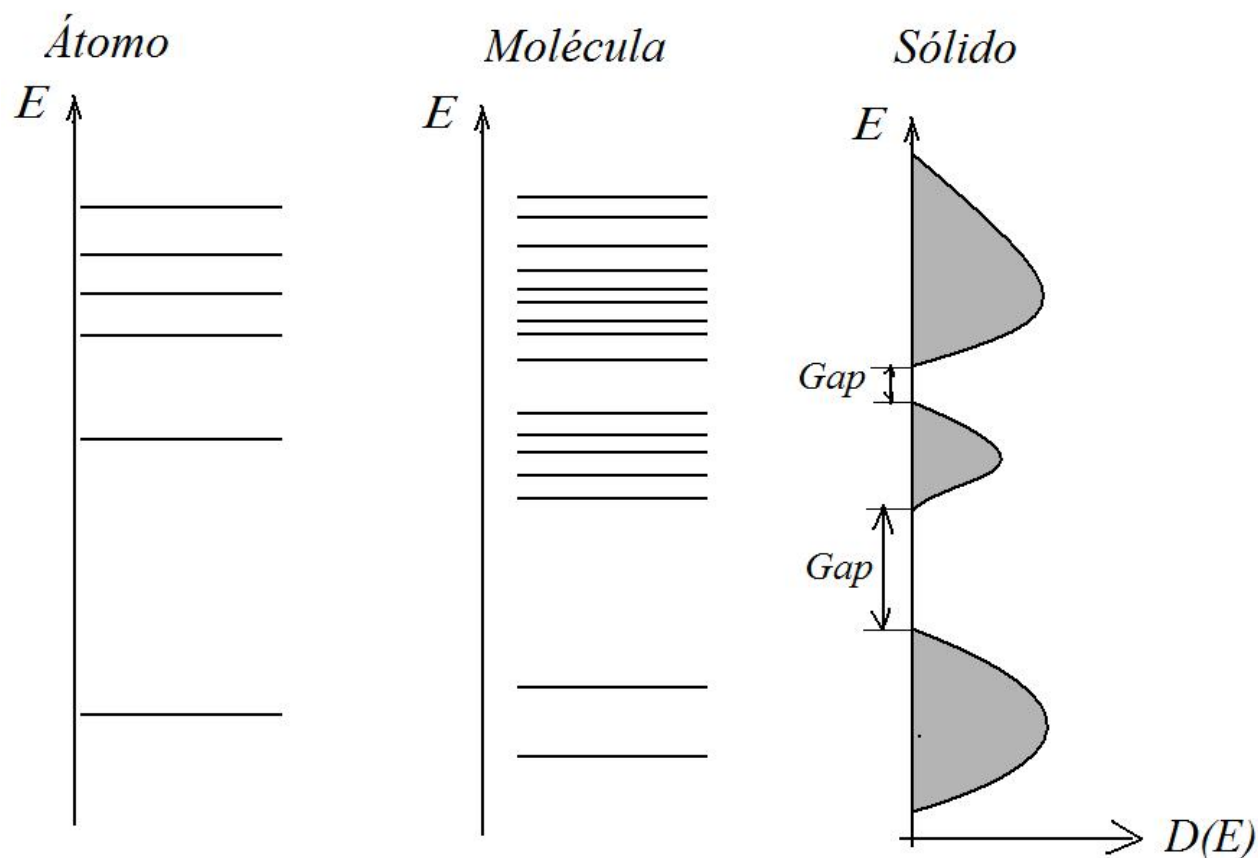


Figure 4: Estrutura de Bandas: do átomo ao sólido o espectro de energia outrora discreto passa a ser contínuo. Ainda assim podem existir gaps, devido a níveis que se desdobraram mas não houve superposição com outros níveis desdobrados.

↪ Quando passamos ao regime do estado sólido é mais conveniente falar em densidades de estados de energia, que corresponde ao número de estados disponíveis para ocupação por unidade de energia. Definindo-se então:

$$D(E) = \frac{\Delta N(E)}{\Delta E}, \quad (53)$$

sabemos que haverão $\Delta N = D(E)\Delta E$ estados físicos disponíveis para os elétrons.

↪ Para um átomo ou uma estrutura molecular simples, é claro que os níveis são discretos, e podem ser representados, em termos de uma densidade, por funções delta de Dirac:

$$D(E) = \sum_n D_n \delta(E - E_n). \quad (54)$$

↪ Quanto à estrutura dos sólidos devemos saber que a estrutura de bandas será definida por um conjunto de fatores como:

→ Estrutura cristalina;

→ Tipo de átomo que compõe a rede cristalina e grau de pureza;

→ Tipos de interações admissíveis entre os átomos desse sólido.

O tipo de átomo também define o número total de elétrons por unidade de volume. Devemos, após descobrirmos a estrutura de bandas, colocar cada elétron em um nível de energia disponível, até que todos os elétrons tenham sido alocados em algum nível de energia, sempre iniciando da mais baixa até a mais alta, respeitando o princípio de Exclusão de Pauli.

↪ O último nível de energia preenchido é usualmente conhecido como nível de Fermi.

Em função do preenchimento das bandas podemos classificar os materiais em:

→ Isolantes;

→ Condutores;

→ Semicondutores.

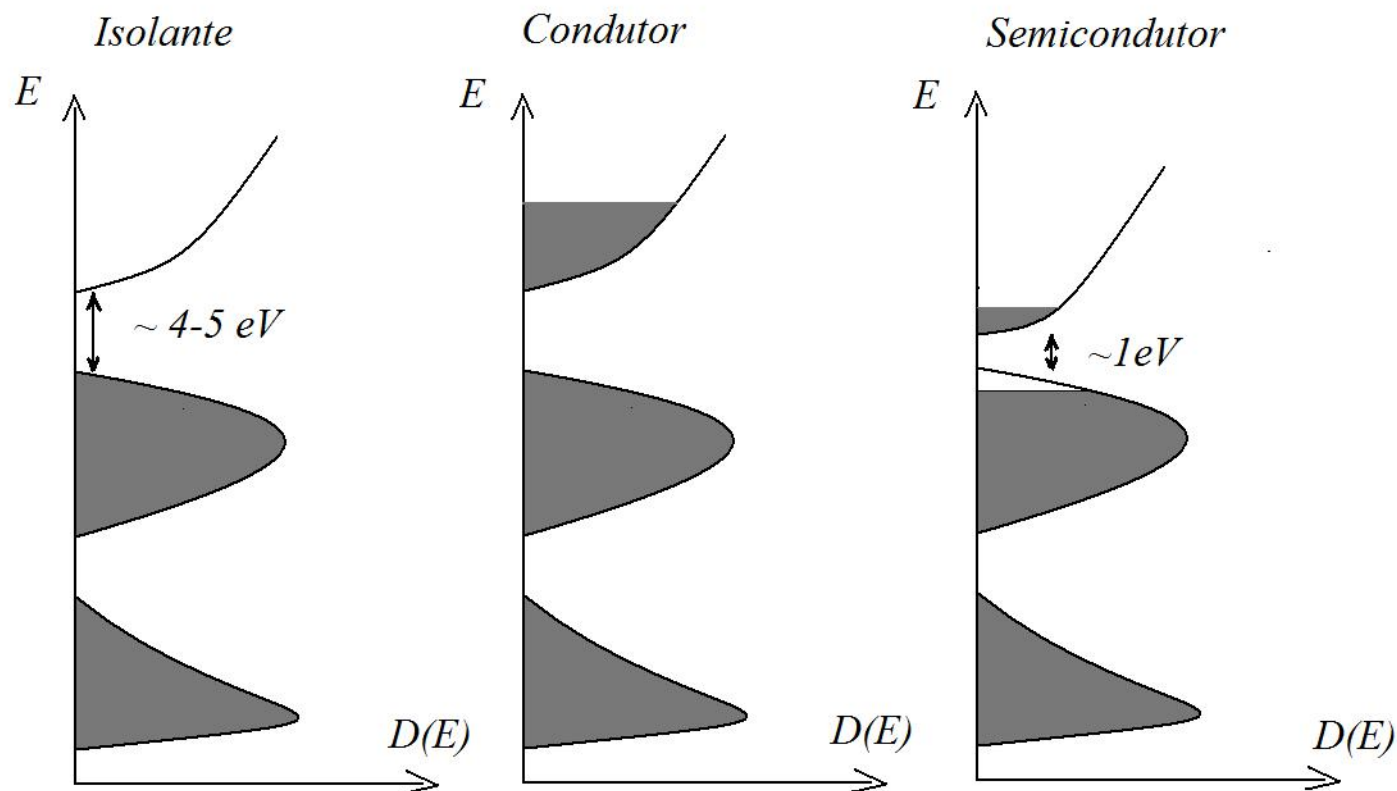


Figure 5: Estrutura de Bandas Simplificada dos Materiais: em um isolante a banda de valência está completamente cheia enquanto a de condução está vazia; para um condutor a banda de valência confunde-se com a banda de condução pois está parcialmente preenchida. Já os semicondutores seriam isolantes a $T = 0K$, mas o gap é pequeno permitindo excitação térmica da condução.

↪ Nos condutores a energia de Fermi, E_F , correspondendo ao último nível de energia preenchido, está dentro da banda de condução (BC). Logo acima de E_F há estados disponíveis. Dessa forma qualquer energia é suficiente para retirar algum elétron do seu estado fundamental. Em geral ocorre com os metais, pois estes tem em seus átomos, a última camada praticamente vazia, formando no sólido uma banda fracamente preenchida.

↪ Isolantes são formados de átomos com camadas de valência praticamente cheia, e isso se traduz na estrutura de bandas. A banda de valência (BV) fica cheia e aparece um gap para a próxima região de estados disponíveis. A BC fica vazia. A ordem do gap é de 4 a 5eV. Em geral são necessários altos campos aplicados, processos ópticos ou altas temperaturas para promover os elétrons da banda de valência para a banda de condução.

↪ Semicondutores seriam isolantes em baixas temperaturas, com gap da ordem de 1eV. Os átomos que formam um semicondutor possuem sua camada de valência preenchida até a metade, mas no sólido por conta das ligações covalentes, a BV fica praticamente cheia. A temperatura é capaz de promover alguns elétrons da BV para a BC, o que não ocorre em um isolante em temperatura ordinárias. A dopagem introduz níveis dentro do gap aumentando a condutividade.

Estatística Quântica

↪ Na mecânica quântica as partículas tem a propriedade de serem indistinguíveis entre si, e nesse caso, conjuntos de muitas partículas devem satisfazer simetrias de permutação.

↪ Podemos separar as partículas quânticas em dois tipos: Férmions e Bósons.

↪ Teorema Spin-Estatística assegura que todas as partículas de spin semi-inteiro ($1/2, 3/2, 5/2, \dots$) são férmions e partículas de spin inteiro ($0, 1, 2, 3, \dots$) são bósons.

↪ Em geral, considerando-se partículas fundamentais os férmions são os constituintes da matéria: elétrons, prótons e nêutrons, no caso da matéria condensada.

↪ Os bósons são os portadores da interação entre os férmions. Ex.: interação eletromagnética - fóton; vibrações de uma rede cristalina - fônons, etc

Estatística de Fermi-Dirac

↪ Partículas com spin semi-inteiro devem satisfazer o princípio de exclusão de Pauli.

↪ A função de ondas total de um sistema de férmions deve ser anti-simétrica pela permuta de dois férmions.

↪ As partículas de spin semi-inteiro satisfazem as estatísticas de Fermi-Dirac, dada abaixo:

$$f_{FD}(E) = \frac{1}{e^{\beta(E-E_F)} + 1}, \quad (55)$$

onde E_F é denominado nível de Fermi e $\beta = 1/(k_B T)$. Nota-se facilmente que se $\beta \rightarrow \infty$, para $E < E_F$ a função tende para a unidade enquanto que para $E > E_F$ a probabilidade de ocupação cai para zero.

Estatística de Bose-Einstein

↪ Para partículas de spin inteiro, denominadas bósons, a permuta de duas delas não altera o sinal da função de ondas total. A função de ondas total deve ser simétrica pela permuta.

↪ Os bósons não precisam satisfazer o princípio de exclusão de Pauli.

↪ Bósons satisfazem uma estatística denominada estatística de Bose-Einstein, que fornece o número de ocupação de um estado físico de energia E , na forma

$$f_{BE}(E) = \frac{1}{e^{\beta E} - 1}, \quad (56)$$

onde $\beta = 1/(k_B T)$

↪ Os fótons satisfazem uma estatística de Bose-Einstein.