

## CRISTALES.

La palabra **crystal** se asocia principalmente con uno de los tres estados de la materia: los sólidos, a pesar de que existen sólidos que no son cristalinos y líquidos que si lo son.

**El sólido cristalino está compuesto de átomos en posiciones fijas y ordenadas, y presenta una estructura periódica que es característica tanto de cristales de gran tamaño como de partículas de polvo.**

No todos los sólidos cristalinos tienen forma idéntica; sino que cada variedad se identifica por una simetría determinada. La sal común, por ejemplo, se cristaliza en una estructura cúbica llamada cúbica de caras centradas donde cada átomo de sodio tiene seis átomos de cloro como vecinos más próximos y todos sus seis átomos son equidistantes.

Por nuestra parte el estudio implica los metales, como por ejemplo, el plomo, el oro, el cobre entre otros que también cristalizan en esta forma.

Existe otro tipo de estructura llamada cúbica de caras centradas a la que pertenece una de las formas cristalinas del hierro (hierro  $\alpha$ ).

Los semiconductores de la columna IV (grupo IV) de la Tabla Periódica de los elementos, entre los que se encuentra el Silicio y el Germanio, cristalizan en la estructura de diamante, que se produce como resultado de los enlaces covalentes.

Una estructura de diamante está compuesta por dos redes de tipo cúbico de caras centradas las cuales se desplazan, una con respecto a la otra, por un cuarto de la diagonal del cubo.

Teniendo como base la importancia de los sistemas cúbicos en el área de la electrónica definiremos el estudio de los sólidos cristalinos a partir de la ciencia que los estudia.

**La Cristalografía de los rayos X estudia la estructura atómica de la materia,** esta disciplina científica también estudia los sólidos amorfos, películas, membranas, fibras, vidrios, líquidos y gases.

**El objetivo principal de la cristalografía es entender las propiedades de la materia que se encuentran bajo la influencia de los arreglos atómicos espaciales específicos y de las interacciones atómicas de los átomos que la forman.**

La **propiedad** visible más noble de los cristales **es su forma geométrica,** los cristales generalmente tienen superficies planas y estas superficies se hallan ordenadas en relaciones definidas entre sí.

En un sólido cristalino se observa que las caras de este material tienen formas o contornos característicos y que los ángulos entre las caras son constantes y característicos. Es de recordarse que casi todos los sólidos se encuentran como cristales en virtud de la agrupación ordenada de los iones, átomos o moléculas que lo componen.

La disposición ordenada de las partículas se refleja en el aspecto geométrico regular de su exterior, como consecuencia de su colocación en los puntos principales de poliedros regulares.

Una definición más actual de un sólido cristalino es: **Una sustancia que tiene sus partículas constituidas en un arreglo interno regularmente ordenado,** esta definición se basa en su estructura interna, y de aquí que los cristales pueden pertenecer a cualquiera de los siguientes sistemas cristalinos.

1. **Cúbicos.**
2. **Tetragonal.**
3. **Hexagonal.**
4. **Ortorómbico u ortogonal.**
5. **Monoclínico.**
6. **Triclínico.**

Además un sólido cristalino basado en sus propiedades físicas se señala como:

**Una sustancia que conserva fijos la forma y el volumen.**

Estas definiciones anteriores del sólido cristalino, nos permitirán establecer la diferencia que existe entre un sólido amorfo y un sólido cristalino.

**Los sólidos amorfos son en realidad líquidos sobre enfriados, enfriados muy por abajo de sus puntos de congelación** (debido a que tienen el mismo desorden molecular de los líquidos y por supuesto carecen de una organización a nivel atómico regular), **sin que realmente se congelen.** Son sólidos sin formas geométricas regulares y se les llama: **Vidrios.**

**René Haüy** sugirió que los cristales se constituían de unidades fundamentales distribuidas en un ordenamiento perfectamente regular y que la constancia de los ángulos entre las caras era una propiedad de esta regularidad.

Es por las razones anteriores que la **Cristalografía** estudia a los sólidos cristalinos, la definición de la cristalografía es:

La rama de la ciencia que trata de la geometría, propiedades y estructuras de las sustancias cristalinas.

Y la **Cristalografía Geométrica**: Estudia a los agrupamientos especiales externos de los planos cristalinos y formas geométricas de los cristales, basándose en las tres leyes fundamentales:

1. **Ley de la constancia de los ángulos interfaciales.**
2. **Ley de la racionalidad de los índices**
3. **Ley de simetría.**

El entendimiento de las anteriores leyes nos permitirá establecer claramente el estudio de este tipo de sólidos, por lo que se señalan sus enunciados.

**LA LEY DE LA CONSTANCIA** de los ángulos interfaciales establece que para una sustancia, las caras correspondientes a los planos que forman la superficie externa de un cristal interceptan en un ángulo definido, y éste permanece constante, sin importar como desarrollan las caras que comúnmente lo hacen en forma desigual en tamaño y forma, pero el ángulo de intersección de dos caras correspondientes, es siempre la misma, para cualquier cristal de la misma sustancia.

**LA LEY DE LA RACIONALIDAD** de los índices o parámetros, establece la posibilidad de elegir a lo largo de tres ejes coordenadas distintas unitarias: **a**, **b**, y **c**, que son NO forzosamente iguales entre sí, tales intersecciones en un plano están dadas por: **ma**, **nb** y **pc**; donde **m**, **n** y **p** son números enteros incluso infinito o fracciones de números enteros.

Los coeficientes **a**, **b** y **c** se denominan **INDICES DE WEISS** del plano, pero también existen los llamados **INDICES DE MILLER**, que se obtienen tomando los recíprocos de los índices de Weiss y multiplicándolos por el número menor que transforma todos los recíprocos en números enteros.

**LA LEY DE LA SIMETRÍA** establece que todos los cristales de la misma sustancia poseen los mismos elementos de simetría, de la cual existen tres tipos posibles.

1. Un cristal se divide por un plano imaginario que pasa por su centro, en dos mitades iguales entre sí que son la una imagen de la otra, se dice entonces que el cristal posee un plano de simetría.

2. Un cristal tiene una línea de simetría si es posible dibujar una línea imaginaria que pase por su centro de manera que al hacerlo girar  $360^{\circ}$ , el cristal aparece sin cambio dos, tres, cuatro o seis veces, y en función a este grado de repetición se dice que posee un eje de simetría binario, terceario, cuaternario o senario.

3. El cristal posee un centro de simetría, si cada cara tiene otra idéntica en el lado opuesto de este centro.

Existen 230 formas cristalinas que en base a su simetría se agrupan en 32 clases que a su vez están incluidas en los seis sistemas ya hemos mencionado.

Pero en combinación de un análisis matemático y de las leyes ya mencionadas, existen **14 tipos de REDES CRISTALINAS O ESPACIALES.**

Las redes cristalinas son:

**1. Cúbico**

- 1.1. Cúbico simple.
- 1.2. Cúbico de cuerpo centrado.
- 1.3. Cúbico de caras centradas.

**2. Tetragonal.**

- 2.1. Tetragonal simple.
- 2.2. Tetragonal de cuerpo centrado.

**3. Hexagonal.**

3.1. Hexagonal romboédrico.

**4. Ortorómbico.**

4.1. Ortorómbico simple.

4.2. Ortorómbico de cuerpo centrado.

4.3. Ortorómbico de caras básicas centradas.

4.4. Ortorómbico de caras centradas.

**5. Monoclínico.**

5.1. Monoclínico simple.

5.2. Monoclínico de caras básicas centradas.

**6. Triclínico.**

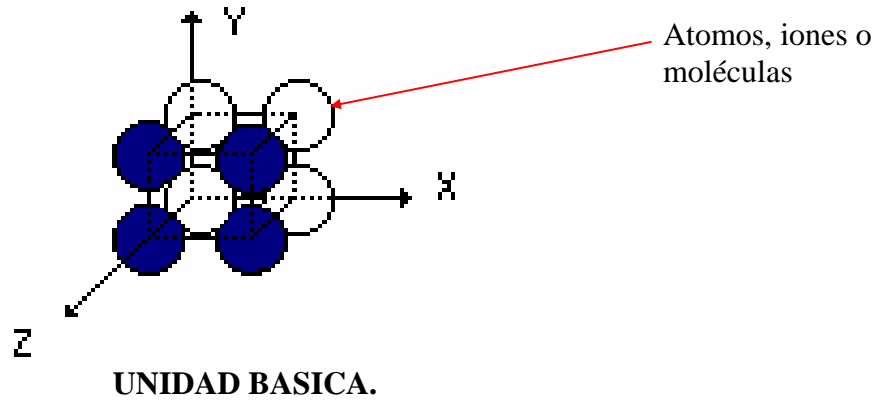
**Haüy** llamó a su unidad fundamental "molécula componente" la cual recibe el nombre de celda unitaria.

¿ Qué es una celda unitaria?

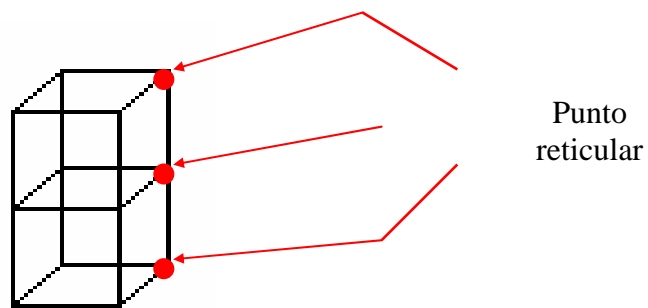
**Es la unidad básica repetitiva de la disposición de átomos, iones o moléculas en un sólidos cristalino.**

Unidad básica repetida una y otra vez en tres dimensiones. Esta celda unitaria engendra la red del cristal, como se muestra en la siguiente figura.

## ESPACIO TRIDIMENSIONAL



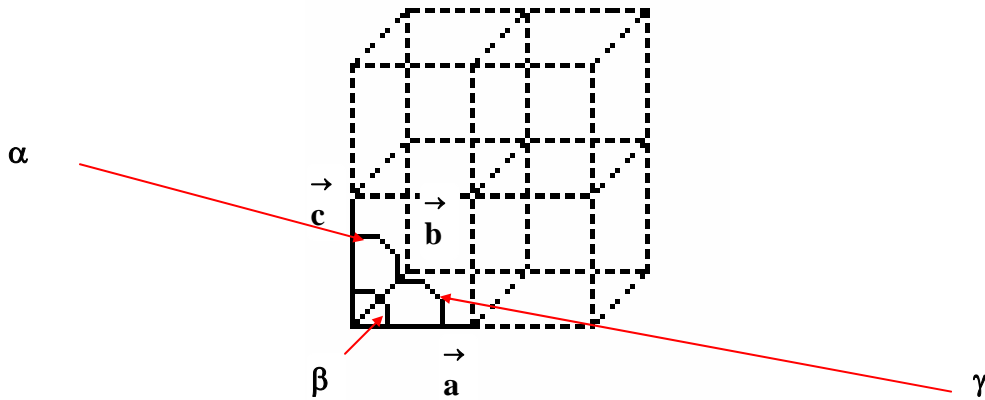
Si en una celda unitaria, se centra en los átomos, iones o moléculas un punto en el centro de cada una de las posiciones atómicas (por ejemplo), se recibe este el nombre de punto reticular, y el orden geométrico de estos puntos reticulares se llama estructura cristalina.



Considerando que únicamente nos interesa el estudio del sistema cúbico, la geometría del sistema es el siguiente:

SISTEMA.	EJES.	ANGULOS AXIALES.
CUBICO	$a = b = c$	Todos los ángulos = $90^{\circ}$

El siguiente dibujo muestra la red cristalina tridimensional mostrando varias celdas unitarias.



En un cristal existen tres unidades de traslación que pueden por tres vectores..  $\vec{a}$  ,  $\vec{b}$  y  $\vec{c}$

Y que no están todos en el mismo plano. Las longitudes de estos vectores se encuentran representados por:  $a$ ,  $b$  y  $c$  (que son coeficientes que se denominan INDICES DE WEISS).

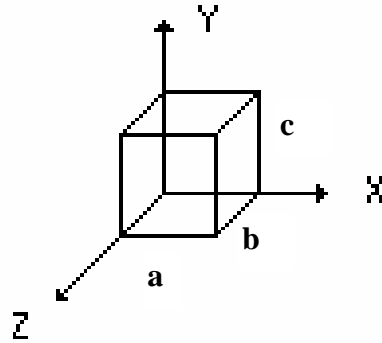
Así que los ángulos entre ellos se representan por:  $\alpha$ ,  $\beta$  y  $\gamma$ .

La posición de un plano en el espacio puede representarse por tres puntos en un sistema de coordenadas con ejes X, Y y Z, siendo posible determinar la cara de un cristal observando sus puntos de intersección con los tres ejes, acostumbrándose definirlos en función de los **índices de Miller**.

Para ilustrar lo anterior, consideremos una celda unitaria para un sistema cúbico señalando los índices de Miller.

Si las unidades de distancia a lo largo de los ejes de referencia X, Y y Z, son llamados  $a$ ,  $b$  y  $c$  ( los índices de Weiss) son respectivamente como se muestran en el dibujo:





Los índices de Miller son las recíprocas de las intersecciones expresadas como una relación de números enteros pequeños.

Ejemplo: Si un plano corta a los ejes X, Y y Z en..

(2,1,1/2) respectivamente para:

$$\begin{aligned} a &= 2 \\ b &= 1 \\ c &= 1/2 \end{aligned}$$

respectivamente sus recíprocas son: (1/2,1,2)

Los índices de Miller se obtendrían de multiplicar estos valores dados por el número menor que transforma a todos los recíprocos en números enteros:  $2 (1/2,1,2) = (1,2,4)$ .

Haciendo las consideraciones de los índices de Miller podemos obtener:

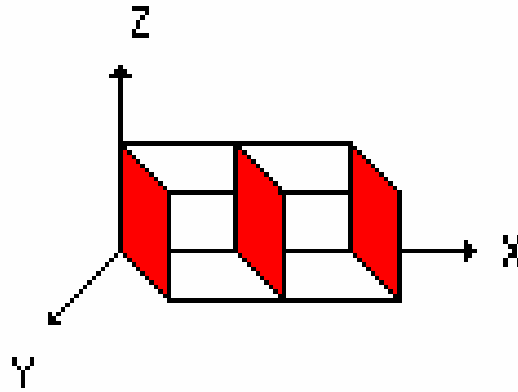
**a).**- Los planos que cortan el eje de las X en **a** o algún otro entero múltiplo de **a**, y que son paralelos a los ejes Y y Z, los cuales se tienen como INDICES DE MILLER.

Para:

$$\begin{array}{ccc} X & Y & Z \\ (1/2, & 0, & 0) = 2 (1/2, & 0, & 0) = (1, 0, 0) \end{array}$$

llamándoseles **planos 100**

Y su representación es:

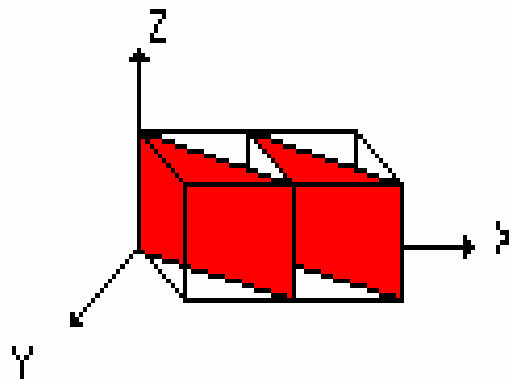


b).- Los ejes X y Y en **a** o algún múltiplo entero de **a**, y que son paralelos al eje de los Z tienen como INDICES DE MILLER de:

$$\text{Para: } \begin{matrix} X & Y & Z \\ (1/2, & 1/2, & 0) \end{matrix} = 2 \begin{matrix} (1/2, & 1/2, & 0) \end{matrix} = (1, 1, 0)$$

llamándoseles **planos 110**

Y su representación en el plano tridimensional es:

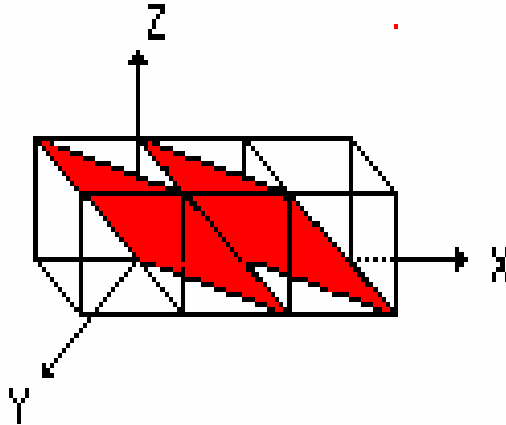


c).- Los planos que cortan los ejes X, Y y Z en **a** o algún múltiplo entero de **a** tienen INDICES DE MILLER de:

Para: 
$$\left( \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right) = 2 \left( \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right) = ( 1, 1, 1 )$$

llamándoseles **planos 111**

Y esta es su representación tridimensional:



Los tipos más sencillos de celdas unitarias y a las que vamos a dedicar este estudio (como ya lo hemos mencionado) es la celda cúbica del sistema cúbico, este tipo de sistemas se encuentra a su vez dividido en:

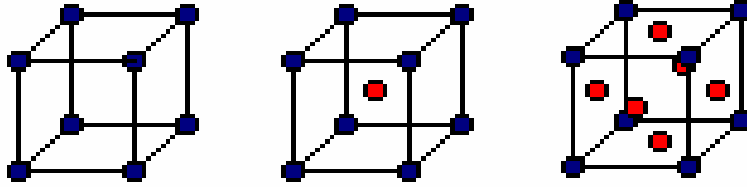
- a).- **Sistema cúbico simple.**
- b).- **sistema cúbico de cuerpo centrado.**
- c).- **Sistema cúbico de caras centradas.**

APUNTES DE CRISTALES.

Academia de Química.

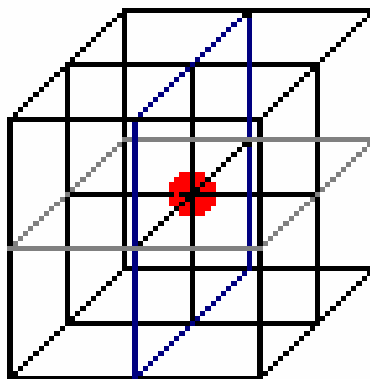
Profesor: LUISA REYNA MUÑOZ LOZANO.

Sus representaciones esquemáticas respectivamente son:

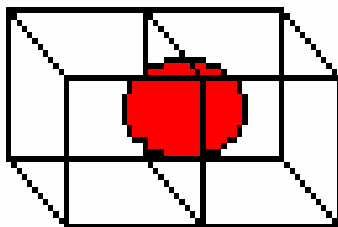


Para determinar el número de átomos por celda unitaria, se debe tener en cuenta que los átomos en las esquinas o caras son compartidos con celdas contiguas.

Un átomo es compartido por 8 celdas unitarias en cada una de las esquinas en los tres tipos de celdas unitarias, y 2 celdas unitarias comparten un átomo cuando el sistema es cúbico de caras centradas como se muestra en la figuras.



8 CELDAS UNITARIAS COMPARTEN UN ATOMO.



2 CELDAS UNITARIAS COMPARTEN UN ATOMO.

En función de lo anterior tenemos que:

a).- Una celda cúbica simple contiene equivalente de un sólo átomo (8 esquinas a  $1/8$  de átomo compartido por cada una de las 8 celdas unitarias).

**$8 \times 1/8 = 1$  átomo equivalente para una celda unitaria del sistema cúbico simple.**

b).- Una celda cúbica de cuerpo centrado contiene el equivalente de un sólo átomo (8 esquinas a  $1/8$  de átomo compartido por cada una de las 8 celdas unitarias y un átomo en el centro de la celda unitaria que nadie comparte).

**$8 \times 1/8 = 1$  átomo.  
1 átomo en el centro de la celda unitaria.**

-----  
**2 átomos equivalentes para una celda unitaria de un sistema cúbico de cuerpo centrado.**

c).- Una celda cúbica de caras centradas contiene el equivalente de un sólo átomo (8 esquinas a  $1/8$  de átomo compartido por cada una de las 8 celdas unitarias y un átomo que se comparten en  $1/2$  por cada 2 celdas unitarias en los extremos de la celda unitaria principal o analizada).

$$8 \times 1/8 = 1 \text{ átomo.}$$

$$6 \times 1/2 = 3 \text{ átomos.}$$

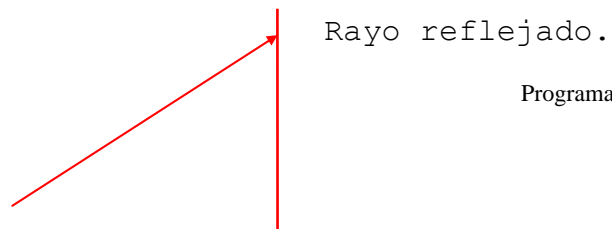
-----  
4 átomos equivalentes para un sistema cúbico de caras centradas.

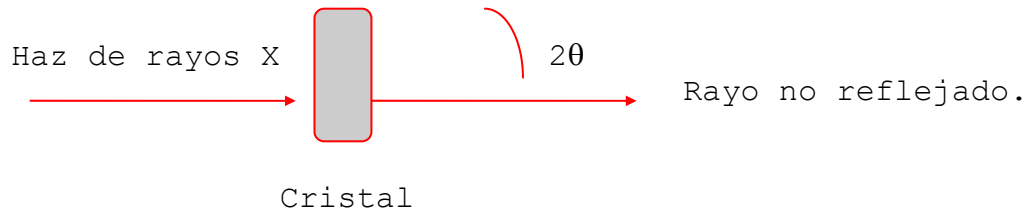
#### DIFRACCION DE LOS RAYOS X POR CRISTALES.

Los rayos X son ondas electromagnéticas de corta longitud de onda y alta energía, este tipo de longitudes de onda fueron usados para el análisis de los sistemas cristalinos por dos científicos ingleses W.L. Bragg y W. H. Bragg, los cuales determinaron la localización de los átomos de un cristal de ZnS mediante **el análisis matemático de los patrones de difracción de los rayos X en esta sustancia.**

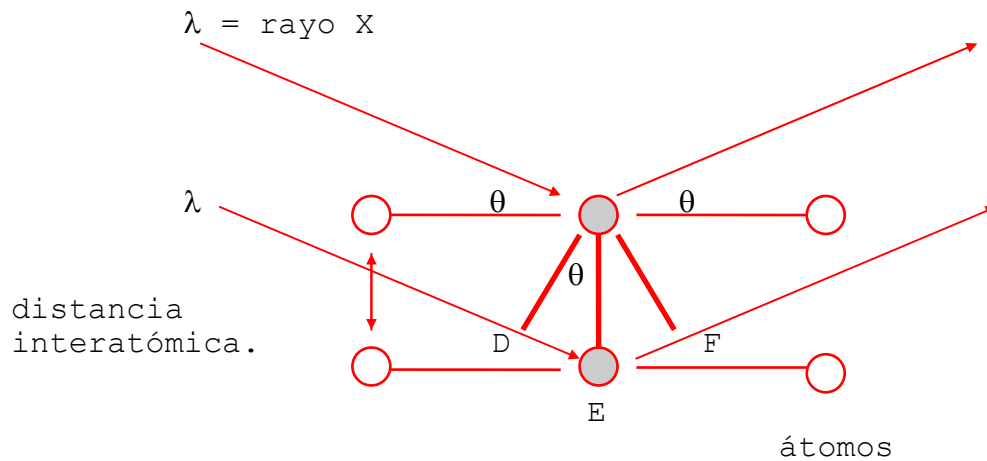
Los rayos X emitidos están en fase e inciden sobre la muestra y el rayo X son dispersados o reflejados sobre los átomos en la primera capa del sólido cristalino, el mismo fenómeno se repite en el átomo que se encuentra en la segunda capa y así sucesivamente para todos los átomos de la red cristalina.

Esta dispersión del haz de luz forma un ángulo que llamaremos  **$2\theta$**  con la capa del cristal como se muestra en la figura.





Así que la distancia interatómica en un cristal se puede observar en la siguiente figura.



Donde  $DE = \text{Sen } \theta$ , en donde la distancia interatómica de los planos y  $\theta$  que es el ángulo de las ondas de rayos X emitidas y el plano.

APUNTES DE CRISTALES.

Academia de Química.

Profesor: LUISA REYNA MUÑIZ LOZANO.

Ahora bien debido a que la distancia DEF es el doble de DE tenemos que:

$$DEF = 2\lambda = 2d \text{ sen } \theta$$

La relación de la **LEY DE BRAGG** permite determinar el espacio que existe entre los planos de longitudes de onda conocida y los valores determinados experimentalmente de  $\theta$ , en los cuales tiene lugar la interferencia constructiva de un sistema cristalino.

Esta ley esta expresada por la siguiente relación matemática:

$$n\lambda = 2d \text{ sen } \theta$$

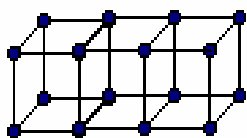
en donde  $n= 1,2,3\dots$ . Y representa en plano del cristal donde el átomo, ion o molécula se encuentra ubicado.

Los experimentos indicaron que la longitud de onda de los rayos X eran del orden de  $10^{-8}$  cm. Calculando para un cristal el número de moléculas por unidad de volumen, **von Laue** sugirió que el arreglo regular de los átomos en los cristales podía usarse como una especie de red de difracción para los rayos X por el carácter ondulatorio de estos rayos al difractarlos sobre un medio cristalino.

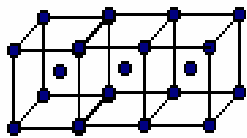


**DISTANCIAS INTERPLANARES.**

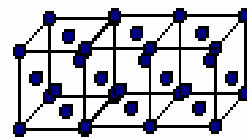
Las distancias interplanares en los tres tipos de redes cristalinas del sistema cúbico son:



**Cúbico simple**



**Cúbico de cuerpo  
centrado**



**Cúbico de caras  
centradas**

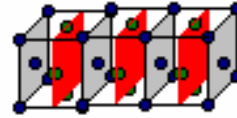
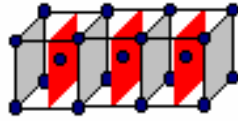
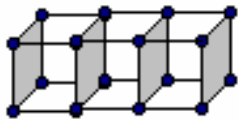
Las distancias interplanares se calculan de acuerdo a la siguiente ecuación:

$$d_{xyz} = \frac{a}{\sqrt{dh^2 + dk^2 + dl^2}}$$

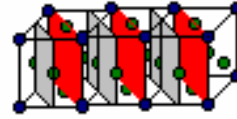
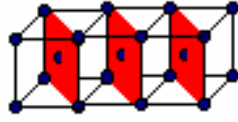
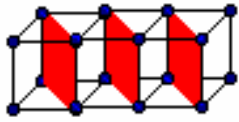
h, k y l son las intersecciones en los ejes de coordenadas

haciendo la consideración que los valores de cada una de las aristas o longitudes interatómicas del sistema cristalino cúbico toman el valor unitario, esto es  $a = b = c = 1$ .

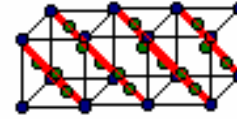
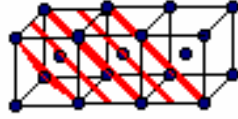
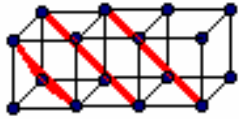
Los planos 100, 110 y 111 en los tres sistemas respectivamente son:



PLANOS 110



PLANOS 111



Cúbico Simple.

Cúbico de cuerpo  
centrado

Cúbico de caras  
centradas

Para las distancias interplanares utilizando la fórmula anterior son:

SISTEMA CUBICO SIMPLE.

$$d_{xyz} = \frac{\text{arista}}{\sqrt{(1)^2 + (0)^2 + (0)^2}} = a \quad \text{PLANO 100}$$

$$d_{xyz} = \frac{\text{arista}}{\sqrt{(1)^2 + (1)^2 + (0)^2}} = \frac{a}{\sqrt{2}} \quad \text{PLANO 110}$$

$$d_{xyz} = \frac{\text{arista}}{\sqrt{(1)^2 + (1)^2 + (1)^2}} = \frac{a}{\sqrt{3}} \quad \text{PLANO 111}$$

SISTEMA CARAS CENTRADAS.

$$d_{xyz} = \frac{\text{arista}}{2 \sqrt{(1)^2 + (0)^2 + (0)^2}} = \frac{a}{2} \quad \text{PLANO } 100$$

$$d_{xyz} = \frac{\text{arista}}{2 \sqrt{(1)^2 + (1)^2 + (0)^2}} = \frac{a}{2\sqrt{2}} \quad \text{PLANO } 110$$

$$d_{xyz} = \frac{\text{arista}}{\sqrt{(1)^2 + (1)^2 + (1)^2}} = \frac{a}{\sqrt{3}} \quad \text{PLANO } 111$$

SISTEMA CUERPO CENTRADO.

$$d_{xyz} = \frac{\text{arista}}{\sqrt{(1)^2 + (0)^2 + (0)^2}} = a \quad \text{PLANO } 100$$

$$d_{xyz} = \frac{\text{arista}}{\sqrt{(1)^2 + (1)^2 + (0)^2}} = \frac{a}{\sqrt{2}} \quad \text{PLANO } 110$$

$$d_{xyz} = \frac{\text{arista}}{2 \sqrt{(1)^2 + (1)^2 + (1)^2}} = \frac{a}{2\sqrt{3}} \quad \text{PLANO } 111$$

**EFEECTO DE LA TEMPERATURA SOBRE LOS SOLIDOS.**

A temperatura ambiente la capacidad calorífica de muchos sólidos es esencialmente constante. Por lo que podemos asignar

APUNTES DE CRISTALES.

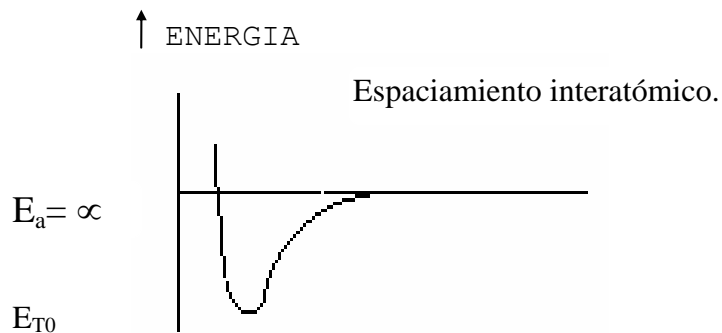
Academia de Química.

Profesor: LUISA REYNA MUÑOZ LOZANO.

una sucesión de intervalos iguales de temperatura al pozo de energía, más con los aumentos sucesivos de la energía el valor medio del esparcimiento interatómico aumenta, y aparece, por lo tanto **la expansión térmica**.

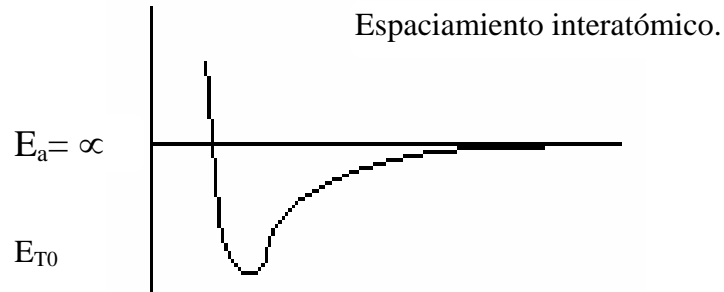
Debe mencionarse que existe un cambio en la dimensión en el sólido para un incremento de la temperatura, hecho que resulta, por ser menor para un material con enlaces fuertes (temperatura de fusión alta), en el cual el pozo de energía es profundo, que para un material con enlaces débiles (temperatura de fusión baja) en el pozo de energía no es tan profundo.

Lo anterior lo podemos observar en el siguiente dibujo:



SOLIDO DE ENLACES FUERTES.

↑ ENERGIA



### SOLIDO DE ENLACES DEBILES.

Para aumentos iguales de energía térmica, el espaciamento interatómico medio cambia tanto menos cuanto más profundo sea el pozo energético del material.

Otra característica a saber, es que, a medida que la temperatura aumenta el cambio en tamaño se vuelve más relativamente pronunciado.

La importancia de estudiar este efecto, es que, la expansión térmica es "isotrópica" sólo en materiales cúbicos y amorfos. Y los sistemas cúbicos son parte del estudio del programa de Química en la carrera de ingeniería en comunicaciones y electrónica.

En otros cristales, la expansión térmica varía con la orientación del cristal en los tres ejes del espacio tridimensional de una celda unitaria o de la red cristalina.

Definamos entonces qué es la anisotropía.

APUNTES DE CRISTALES.

Academia de Química.

Profesor: LUISA REYNA MUÑIZ LOZANO.

Un cristal es ANISOTRÓPICO cuando presenta propiedades diferentes en direcciones diferentes, por efecto de la temperatura (como ya se mencionó).

**La anisotropía** no debería sorprender el que los cambios dimensionales que se producen en un cristal sean aquellas que se acompañan a las variaciones en la temperatura , humedad y carga mecánicas. La razón es que la expansión térmica es 40% mayor en dirección tangencial, que en la dirección radial y 6 a 12 veces mayor en dirección radial que en dirección longitudinal.

La expansión térmica en la dirección longitudinal es relativamente independiente de la densidad, mientras que en las otras dos direcciones depende de la densidad del cristal.



### **CRISTALES IONICOS .**

Propiedades de las sustancias.

1. Puntos de fusión y ebullición elevados.
2. Muy conductores de la corriente eléctrica en estado líquido o en disolución.
3. Solubles en líquidos polares.
4. Cuerpos duros y frágiles.

Naturaleza del enlace: Fuerte atracción electrostática entre iones.

Ejemplos: NaCl, CaF<sub>2</sub>, K<sub>2</sub>O, BaS.

### **CRISTALES MOLECULARES.**

Los cristales moleculares son originados por fuerzas de Van der Waals que son fuerzas muy débiles o pueden ser originados por fuerzas entre dipolos.

Propiedades de las sustancias.

1. Sustancias gaseosas muy volátiles.

Ejemplos: H<sub>2</sub>, O<sub>2</sub> , Cl<sub>2</sub>.

### **CRISTALES COVALENTES.**

Propiedades de las sustancias.

1. Puntos de fusión enorme elevados.
2. Cuerpos muy duros.
3. Insolubles en casi todos los disolventes.

APUNTES DE CRISTALES.  
Academia de Química.  
Profesor: LUISA REYNA MUÑOZ LOZANO.

Naturaleza del enlace: comparación (equivalente o desigual) de pares de electrones.

Ejemplos: C (diamante), SiC, AlN, SiO<sub>2</sub>.

### **CRISTALES DIPOLARES.**

Propiedades de las sustancias.

1. Puntos de fusión y de ebullición bajos pero mayores que los que presentan las sustancias formadas por moléculas no polares de magnitud parecida.
2. Solubles en líquidos polares.

Naturaleza del enlace: Atracciones eléctricas entre dipolos moleculares.

Ejemplos: SO<sub>2</sub>, HCl, PCl<sub>5</sub>.

### **CRISTALES ANALOGOS A LOS DIPOLARES.**

Las moléculas mantienen su individualidad pero menos claramente que en estos últimos.

Propiedades de las sustancias.

1. Puntos de fusión y de ebullición más elevados que los de los cuerpos con molécula de análoga polaridad pero sin posible formación de puentes de hidrógeno.
2. Líquidos de alto poder de disociación de los cristales.

Naturaleza del enlace: Atracción electrostática entre el protón combinado y otro átomo de gran electro-negatividad y volumen pequeño.

APUNTES DE CRISTALES.  
Academia de Química.  
Profesor: LUISA REYNA MUÑOZ LOZANO.

Ejemplos:  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{HF}$ ,  $\text{CH}_3\text{OH}$ .

### **CRISTALES METALICOS.**

Red cristalina de iones metálicos y en ella los electrones de valencia se intercambian rápidamente.

Propiedades de las sustancias.

1. Puntos de fusión y ebullición en general elevados.
2. Conductores de la corriente eléctrica.
3. Brillo metálico.

Naturaleza del enlace: Enlace covalente de cada átomo metálico con algunos de sus vecinos pero rápidamente cambiante a todos ellos.

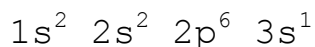
Ejemplos:  $\text{Na}$ ,  $\text{Au}$ ,  $\text{Cu}$ ,  $\text{Zn}$ , Aleaciones metálicas.

### TEORIA DE BANDAS.

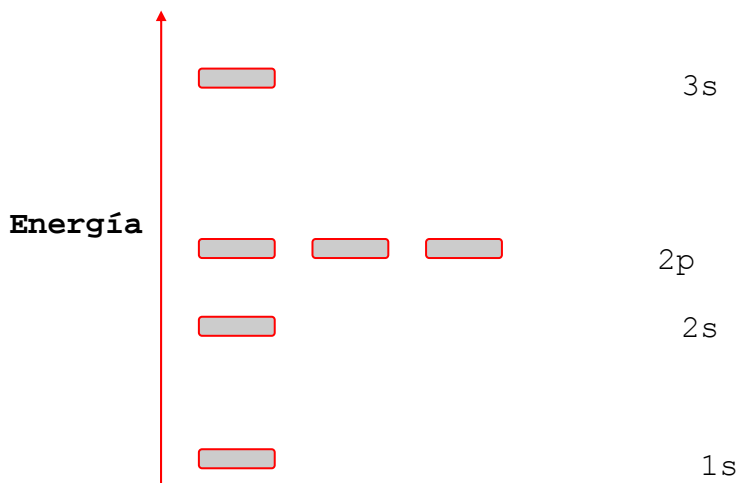
En un sólido, una banda de energía se compone de un gran número de niveles de energía mínimamente separadas, ya que están formados por la combinación de los orbitales atómicos (con energías semejantes) procedentes de cada uno de los átomos dentro de la sustancia.

Recuerda que los electrones de un átomo aislado ocupan sólo orbitales o niveles energéticos, específicos y que existen brechas entre estos niveles.

Para comprender lo anterior, consideremos al Na que contiene  $11e^-$  distribuidos en estos niveles de energía, la configuración electrónica nos indica como son ocupados los niveles de energía para los 11 electrones del Sodio:



esta configuración electrónica en función de la energía es:



El orbital 3s solamente está semi lleno, es claro que las bandas 3p y las de más alta energía, están completamente vacías.

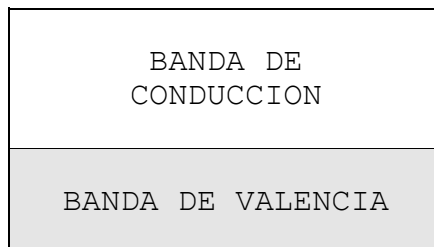
Los estados de energía quedan lugar a una banda se pueden considerar análogos a los orbitales moleculares que se extienden a lo largo de cada cristal. Según el modelo de bandas, una sustancia es un aislante o un metal (conductor eléctrico) dependiendo del llenado de los niveles de la banda.

En una banda completamente llena hay tantos electrones moviéndose en la dirección del campo como en dirección opuesta, los electrones que se mueven en la dirección del campo no pueden ser acelerados, puesto que debido a la existencia de una zona prohibida, no disponen de estados superiores fácilmente accesibles. La sustancia es por consecuencia considerada un aislador.

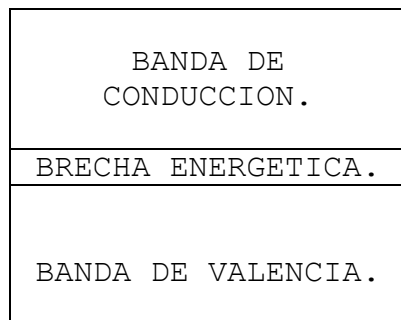
En un metal, la banda de energía no está llena y la aplicación de un campo eléctrico puede acelerar electrones, haciendo uso de estados adyacentes.

Las relaciones de periodicidad de la red conducen a zonas prohibidas de energía. Estas energías prohibidas se pueden considerar como las que corresponden a las energías para las que la longitud de onda electrónica coincidan con la periodicidad de la red; de acuerdo con la ley de Bragg estos electrones serían reflejados y no serían capaces de existir en el cristal como ondas en movimiento.

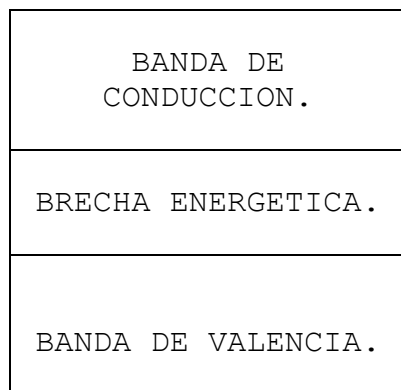
La banda que contiene la capa exterior o nivel de valencia de electrones, se conoce como la banda de valencia. Cualquier banda que esté vacía o parcialmente llena y sea continua en toda la red, se llama banda de conducción. Esto se puede observar tomando de apoyo el siguiente dibujo:



METAL



SEMICONDUCTOR



CONDUCTOR

Los niveles de energía vacíos son importantes para la conducción porque permiten que los electrones suban a niveles más altos al ganar energía en su movimiento hacia electrodo positivo.

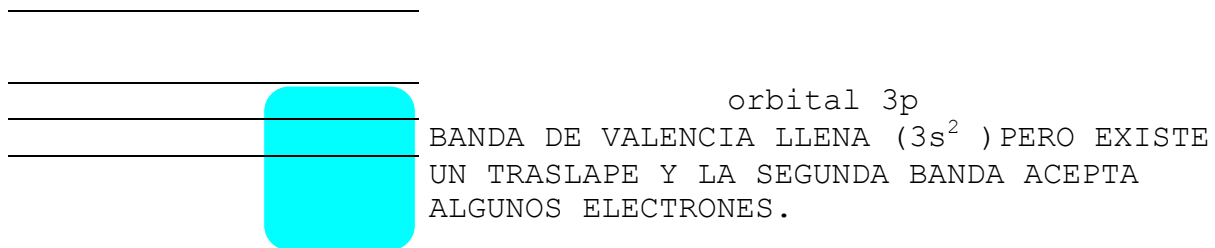
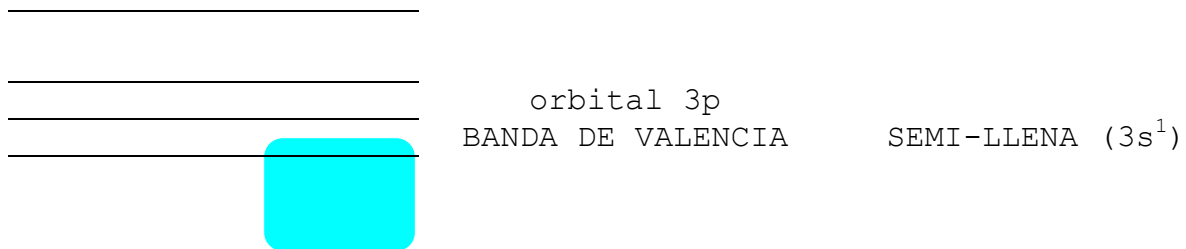
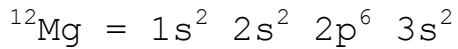
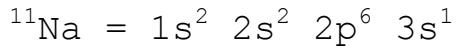
APUNTES DE CRISTALES.

Academia de Química.

Profesor: LUISA REYNA MUÑIZ LOZANO.

El sentido de la corriente eléctrica es de negativo a positivo. Esto sería posible si la banda estuviese completamente llena y existiera una brecha energética por arriba de la banda.

Dependiendo del elemento metálico, por ejemplo: Na° y Mg°; podemos observar la brecha de energía.



Como puede observarse, existen niveles vacíos en la parte alta de sus bandas de valencia.

Los efectos que se producen en los cristales conductores o aislador, se realizan por una propuesta matemática relacionada

APUNTES DE CRISTALES.

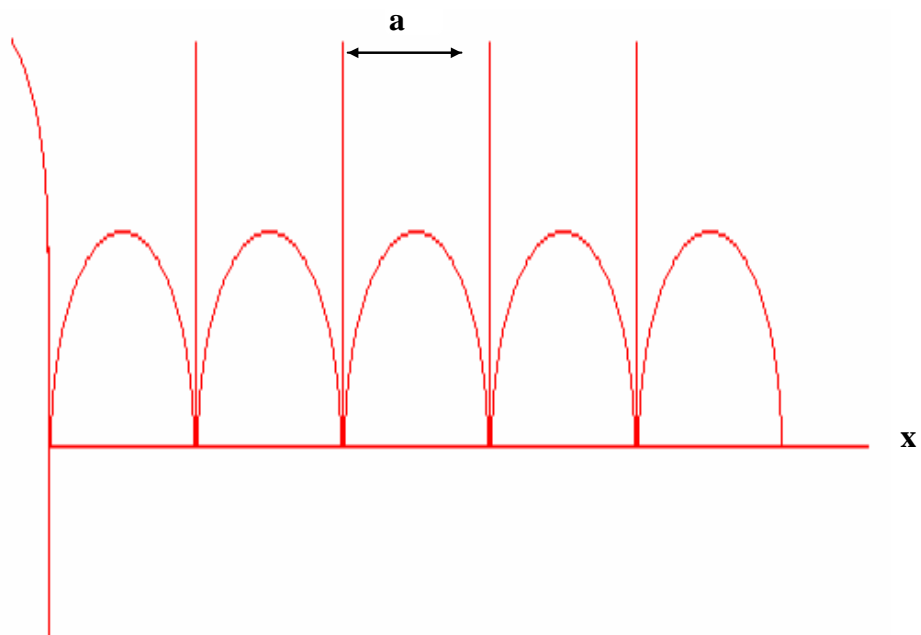
Academia de Química.

Profesor: LUISA REYNA MUÑOZ LOZANO.

con la forma de las funciones de onda de un electrón para un potencial perfectamente periódico, lo anterior recibe el nombre de Teorema de Bloch.

Y su representación es:

Potencial periódico.



Superficie.

Esta es la representación de un potencial dentro de una red perfectamente periódica.

Donde:

a= arista.

x= dirección de voltaje.



## MATERIALES EXTRINSECOS TIPO "N" y TIPO "P".

Las características de los materiales semiconductores pueden alterarse de modo considerable mediante la adición de ciertos átomos de impurezas en el material semiconductor relativamente puro. Estas impurezas, aunque quizá solo se agregue 1 parte en 10 millones puede alterar la estructura de bandas lo suficientemente como para cambiar totalmente las propiedades eléctricas del material.

Un material semiconductor que se ha sometido a este proceso de "impurificación" se denomina material "EXTRINSECO". Hay dos tipos de materiales extrínsecos de importancia invaluable para la fabricación de dispositivos semiconductores:

- a).- Tipo "n".
- b).- Tipo "p".

El tipo "N" se crea añadiendo todos aquellos elementos de impurezas que tenga "cinco" electrones de valencia o pentavalentes (Grupo VA, en tabla periódica); como son: Antimonio, Arsénico y fósforo, todos estos en base de Silicio.

La 5ª valencia no esta asociada con algún enlace covalente particular. El electrón sobrante une débilmente a un átomo padre (Grupo VA) se puede mover con cierta libertad dentro del material tipo "N", a este tipo de impurezas se les llama : Átomos donadores.

El tipo "P" se forma de la impurificación de un cristal puro de Germanio o de Silicio con átomos de impurezas que tengan "tres"

## APUNTES DE CRISTALES.

Academia de Química.

Profesor: LUISA REYNA MUÑOZ LOZANO.

electrones de valencia o trivalentes (Grupo IIIA de la tabla periódica). Y los elementos son: Boro, Galio y el Indio.

Puesto que la vacancia resultante aceptará de inmediato un electrón libre, las impurezas añadidas reciben el nombre de : Átomos aceptores.

En el estado intrínseco (los materiales intrínsecos son aquellos semiconductores que se han refinado con todo cuidado para reducir las impurezas a un nivel muy bajo), el número de electrones libres de Germanio o de Silicio se debe solo a aquellos pocos electrones en la banda de valencia que han adquirido suficiente energía e fuentes térmicas o luminosas, para romper el enlace covalente o las pocas impurezas que podrían no haberse eliminado.

En un material tipo "N" el número de huecos no ha cambiado de manera significativa a partir de este nivel intrínseco.

El resultado neto, es que el número de electrones excede en demasía el número de huecos. Por esta razón, el electrón se denomina portador mayoritario y el hueco portador minoritario, lo inverso se aplica para el tipo "P".

Entre los niveles de energía hay bandas (teoría de bandas) en las que ningún electrón en la estructura atómica aislada puede aparecer conforme los átomos de un material se acercan entre sí para formar la estructura de la red cristalina, cuando esto sucede hay una interacción entre átomos, que dará como resultado que los electrones en una órbita particular de un átomo, tengan niveles de energía un poco diferentes a los de los electrones en la misma órbita de un átomo adyacente.

En resumen el resultado es una expansión de los niveles discretos de energía de los posibles estados de energía para los electrones de valencia correspondientes a esas bandas. Por lo cual es importante la clara comprensión de la importancia química y electrónica de los últimos niveles de energía de los átomos que constituyen a los semiconductores.

APUNTES DE CRISTALES.  
Academia de Química.  
Profesor: LUISA REYNA MUÑIZ LOZANO.