

## Teoría de bandas de energía en los cristales

### Materia y átomos

Números cuánticos				Nombre del nivel	Número de estados	Nombre de la capa
n	l	m	m <sub>s</sub>			
1	0	0	± ½	1 S	2	K
2	0	0	± ½	2 S	2	
2	1	-1	± ½	2 P	6	L
		0	± ½			
		+1	± ½			
3	0	0	± ½	3 S	2	M
3	1	-1	± ½	3 P	6	
		0	± ½			
		+1	± ½			
3	2	-2	± ½	3 D	10	
		-1	± ½			
		0	± ½			
		+1	± ½			
		+2	± ½			

#### ◆ Números cuánticos

- $n$  : número cuántico principal (capa)
- $l$  : momento angular orbital (forma de la órbita)
- $m_l$  : magnético orbital (orientación de la órbita)
- $m_s$  : Espin (sentido de giro)

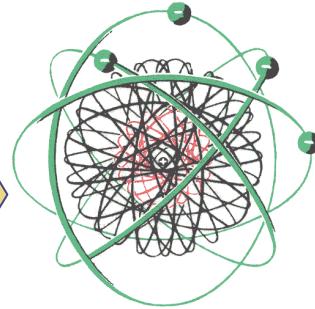
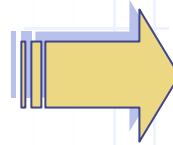
#### ◆ Principio de exclusión de Pauli

## Teoría de bandas de energía en los cristales

### Materia y átomos

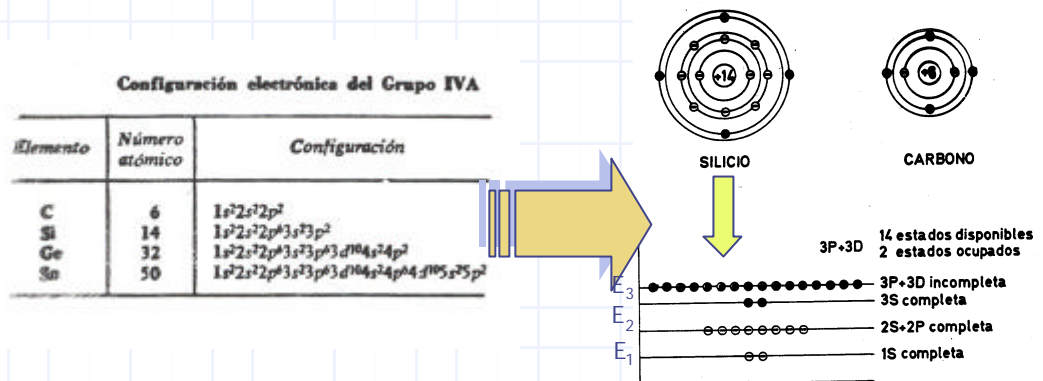
Configuración electrónica del Grupo IVA

Elemento	Número atómico	Configuración
C	6	$1s^2 2s^2 2p^2$
Si	14	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$
Ge	32	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^2$
Sn	50	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p^2$



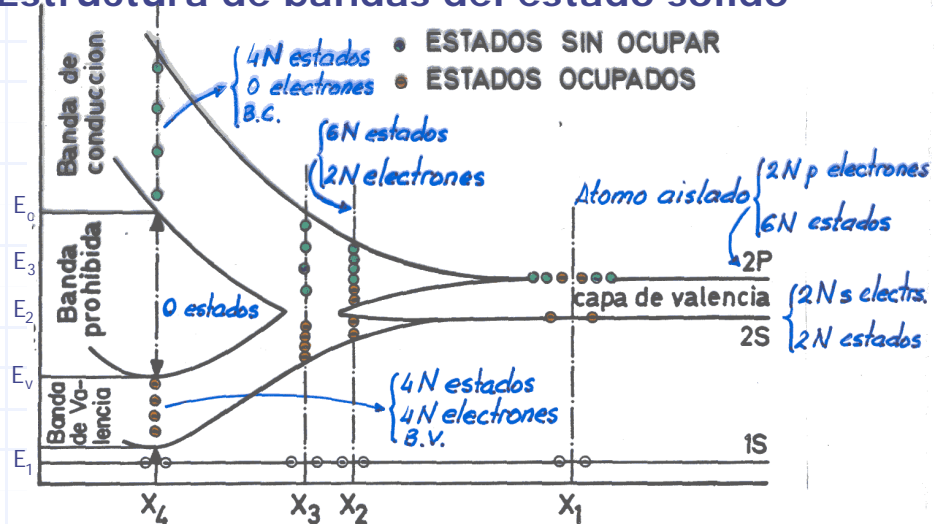
## Teoría de bandas de energía en los cristales

### Materia y átomos



## Teoría de bandas de energía en los cristales

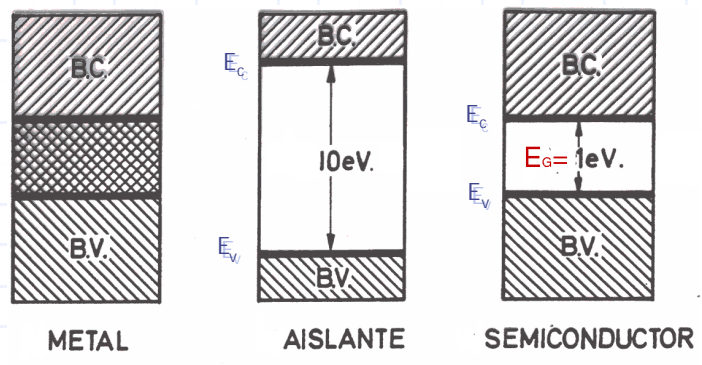
### Estructura de bandas del estado sólido



Los niveles de energía en los átomos forman bandas de energía en los cristales

## Teoría de bandas de energía en los cristales

### Clasificación de la materia desde el punto de vista de su comportamiento eléctrico



## Teoría de bandas de energía en los cristales

### Aislante

- ◆ Conductor muy malo de la electricidad
  - Banda de valencia llena
  - Banda de conducción vacía } Muy separadas
- **Banda prohibida no tiene estados cuánticos**
- ◆ Requiere gran cantidad de suministro de energía para conducir

## Teoría de bandas de energía en los cristales

### Semiconductor

#### ◆ Conductor mediano de la electricidad

- Banda de valencia llena
  - Banda de conducción vacía
  - **Banda prohibida no tiene estados cuánticos**
- } a 0°K

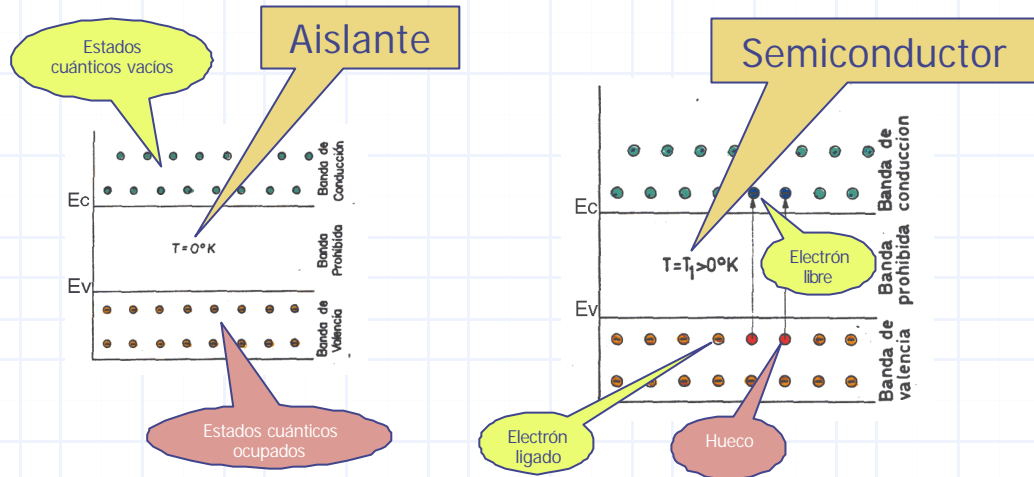
#### ◆ Ancho de la banda prohibida

$$E_G(T) = E_{G0} - kT$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Ge: } E_G(T) = 0,785 - 2,23 \times 10^{-4} T \\ \text{Si: } E_G(T) = 1,21 - 3,6 \times 10^{-4} T \end{array} \right.$$

## Teoría de bandas de energía en los cristales

### Estructura de bandas de un semiconductor





## Teoría de bandas de energía en los cristales

### Metal

#### ◆ Buen conductor de la electricidad

- Banda de valencia
  - Banda de conducción
- } se solapan

#### ◆ No existe banda prohibida

## Teoría de bandas de energía en los cristales

### Estructura cristalina de metales y semiconductores

#### ◆ Cristal.

*Sistema espacial de átomos o moléculas (iones) construido por la repetición sistemática en las tres direcciones del espacio de alguna unidad estructural fundamental .*

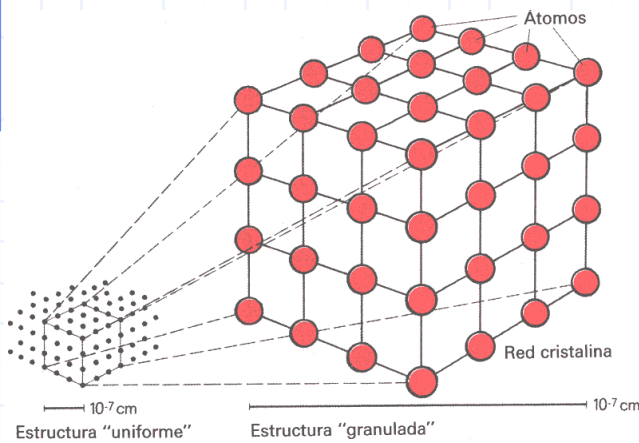
#### ◆ Estructura cristalina

*Está caracterizada por la **energía potencial** que es función periódica del espacio y su valor en cualquier punto es la contribución de todos los átomos que la componen.*

## Teoría de bandas de energía en los cristales

### Estructura cristalina de metales y semiconductores

◆ Número de átomos en un cristal



$$N = \frac{A \times d}{P_a}$$

## Teoría de bandas de energía en los cristales

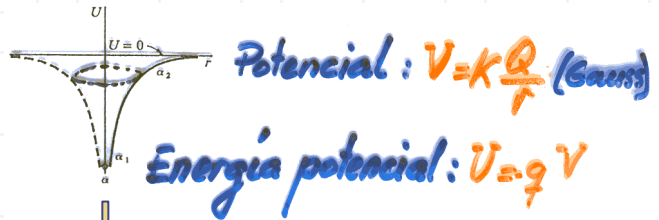
**Ejercicio 1.** En ocasiones es necesario conocer la densidad de átomos que tiene la red cristalina de un metal o semiconductor, bien para calcular la densidad electrónica, la energía del nivel de Fermi, etc. y no se dispone del dato. Pero mediante el número de Avogadro y el peso atómico y la densidad o peso específico del elemento, podremos calcularlo. Calcular la concentración atómica de los elementos que figuran en la tabla.

<b>DATOS</b>				<b>INCOGNITAS</b>
<b>Elemento</b>	<b>Peso atómico</b> (g/mol)	<b>Densidad</b> (g/cm <sup>3</sup> )	<b>Nº de Avogadro</b> (moléculas/mol)	<b>Concentración</b> (átomos/cm <sup>3</sup> )
Carbono (C)	12,01	3,51	6,023E+23	
Silicio (Si)	28,1	2,33	6,023E+23	
Germanio (Ge)	72,6	5,32	6,023E+23	
Estaño (Sn)	118,69	7,3	6,023E+23	

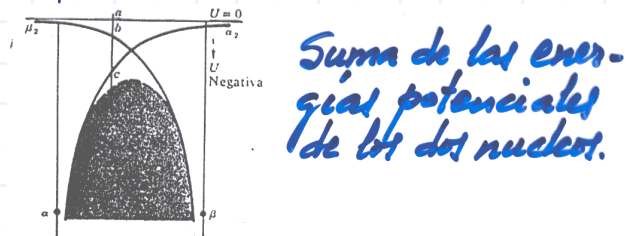
## CONDUCCION EN METALES

### Campo de energía potencial en un metal

Átomo aislado

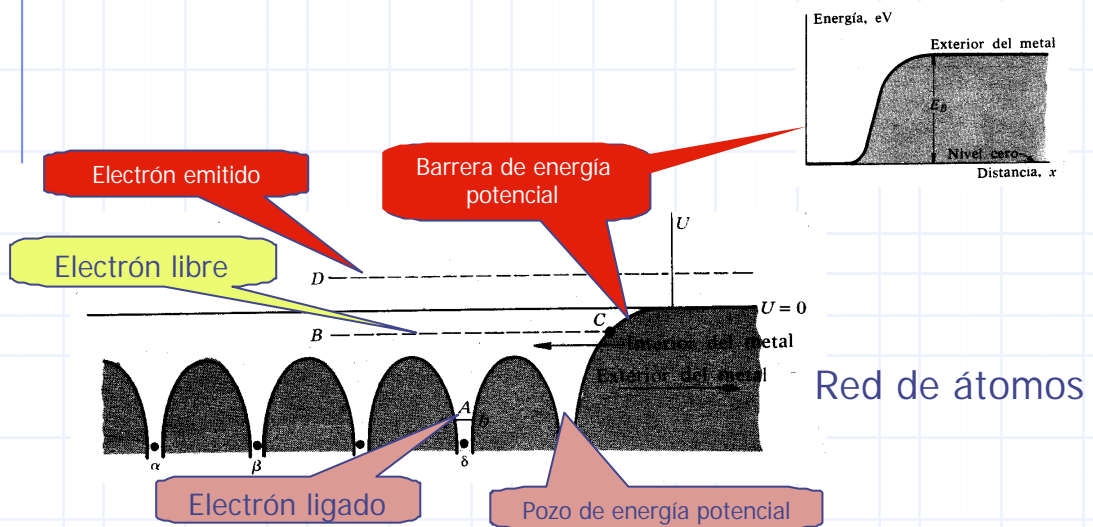


Dos átomos contiguos



## CONDUCCION EN METALES

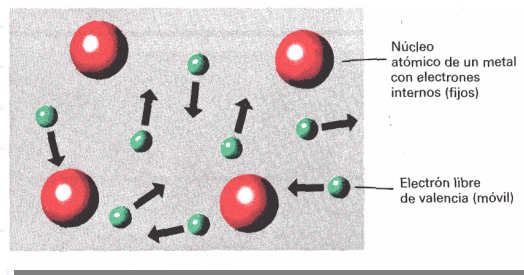
### Campo de energía potencial en un metal



# CONDUCCION EN METALES

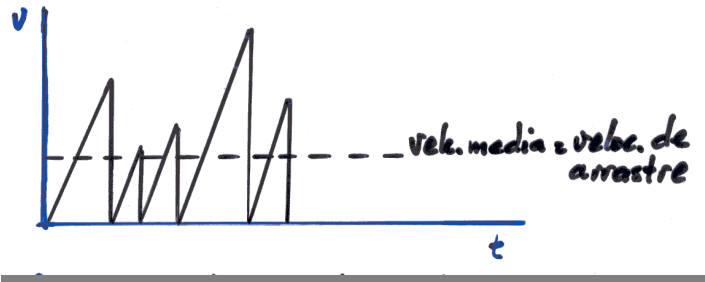
## ◆ Gas de electrones

- Movimientos erráticos
  - Colisiones inelásticas
- { Pérdidas de energía  
    { Cambio de dirección (igual probabilidad)



# CONDUCCION EN METALES

- ◆ Gas de electrones
  - Recorrido libre medio
  - Corriente media NULA
  - Aplicación de un campo eléctrico
    - ◆ Aumento indefinido de la velocidad de los electrones, si no fuera por las colisiones con los iones





## CONDUCCION EN METALES

### ◆ Aplicación de un campo eléctrico

- Velocidad de arrastre  $v = m \times E$
- Densidad de corriente  $J = r \times v$
- Conductividad  $S = r \times m = q \times n \times m$

# CONDUCCION EN METALES

**Ejercicio 2.** Calcular las características de conducción de un metal que se indican de acuerdo con los datos que se aportan.

DATOS		INCOGNITAS	
<b>Elemento</b>	Cobre (Cu)	<b>Densidad de corriente</b> ( $A/cm^2$ )	1,80E+02
<b>Diámetro</b> (cm)	0,103	<b>Velocidad de arrastre</b> (cm/s)	1,331E-02
<b>Resistencia específica</b> (ohmio/cm)	2,14E-04	<b>Campo eléctrico</b> (V/cm)	3,210E-04
<b>Corriente</b> (A)	1,50	<b>Movilidad</b> ( $cm^2/V.s$ )	4,15E+01
<b>Peso atómico</b> (g/mol)	63,54	<b>Conductividad</b> ( $ohmio \times cm$ ) <sup>-1</sup>	5,61E+05
<b>Densidad</b> (g/cm <sup>3</sup> )	8,92		
<b>Electrones de valencia</b>	1		
<b>Nº de Avogadro</b> (moléculas/mol)	6,023E+23		

## CONDUCCION EN METALES

**Ejercicio 3.** ¿Es correcta esta expresión de la conductividad eléctrica de un metal?

$$s = \frac{n \times q^2 \times t}{m}$$

siendo ***n*** la concentración electrónica, ***q*** la carga del electrón, ***t*** el tiempo y ***m*** la masa del electrón.

## CONDUCCION EN METALES

### ◆ Distribución en energía de los electrones libres en un metal

- Función de distribución de energía o densidad de electrones por unidad de energía

$$r_E = f(E) \times N(E)$$

- Densidad de estados cuánticos por unidad de energía

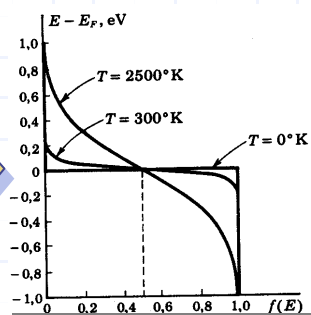
$$N(E) = g \times E^{\frac{1}{2}}$$

- Función de probabilidad de Fermi-Dirac  $f(E)$

# CONDUCCION EN METALES

- ◆ Función de probabilidad de Fermi-Dirac
  - Probabilidad de que un estado cuántico de energía  $E$  esté ocupado por un electrón, también especifica la fracción de todos los estados de energía  $E$  ocupados en condiciones de equilibrio térmico

$$f(E) = \frac{1}{1 + e^{\frac{E - E_F}{KT}}}$$



## CONDUCCION EN METALES

**Ejercicio 4.** Demostrar que la probabilidad de que está ocupado un estado cuántico de nivel de energía  $\Delta E$  por encima del nivel de Fermi es la misma que la de estar vacío un estado de nivel de energía  $\Delta E$  por debajo del de Fermi.

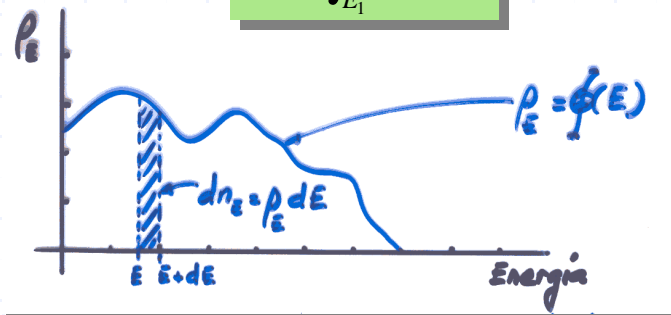
Calcular la probabilidad de encontrar electrones en los niveles de energía 0,1 eV por encima y por debajo del nivel de energía de Fermi, a las temperaturas de 0°K, 150°K, 300°K y 1500°K.

# CONDUCCION EN METALES

◆ Densidad electrónica en un metal.

- Representa el número de electrones libres por unidad de volumen con energías comprendidas entre dos valores dados.
- Expresión:

$$n_E = \int_{E_1}^{E_2} r_E dE$$



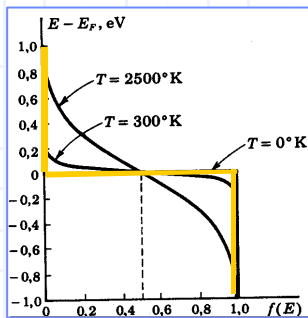
## CONDUCCION EN METALES

**Ejercicio 5.** Calcular la densidad electrónica en el tungsteno metálico cuyos electrones tengan energías comprendidas entre 8,6 y 8,7 eV a las temperaturas de 0°K y 2.000°K.



# CONDUCCION EN METALES

## Función de distribución de energía completamente degenerada



La probabilidad de encontrar un estado cuántico ocupado de energía superior a  $E_F$ , en el cero grados absoluto, es NULA

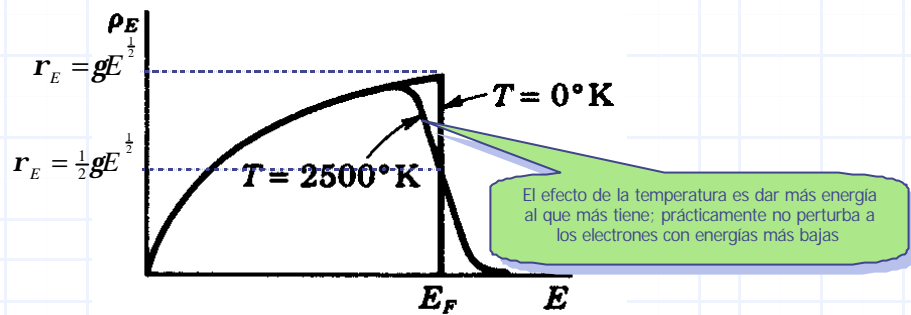
$$T = 0^\circ K \begin{cases} E > E_F \Rightarrow f(E) = 0 \\ E < E_F \Rightarrow f(E) = 1 \end{cases}$$

$$\begin{cases} r_E = 0 \\ r_E = g E^{1/2} \end{cases}$$

Todos los niveles cuánticos de energía inferiores a  $E_F$ , en el cero grados absoluto, están OCUPADOS

# CONDUCCION EN METALES

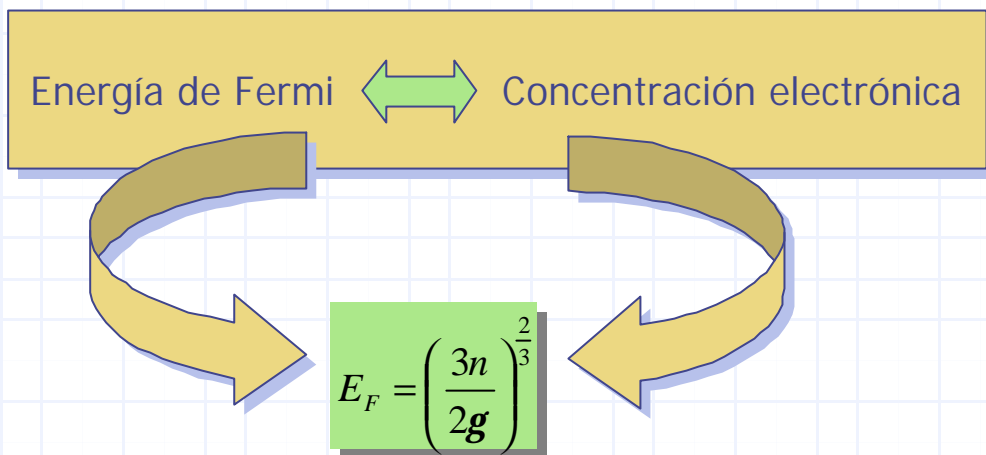
Ejemplo. Función de distribución de energía de los electrones en el tungsteno metálico.



La característica más importante que podemos destacar es que la función de distribución varía muy ligeramente con la temperatura.

# CONDUCCION EN METALES

Función de distribución de energía completamente degenerada



# CONDUCCION EN METALES

**Ejercicio 6.** La energía del nivel de *Fermi*, energía característica de un cristal, se calcula recurriendo a la función de distribución de energía completamente degenerada, ya que ésta nos da la totalidad de electrones libres que hay en el cristal, cuyas energías estarán comprendidas entre cero y la de *Fermi*.

Con los DATOS que se dan **calcular** las INCOGNITAS.

DATOS		INCOGNITAS	
Elemento (cristal)	Cobre (Cu)	Concentración electrónica ( $e/m^3$ )	8,46E+28
Peso atómico (g/mol)	63,54	Energía del nivel de Fermi (eV)	7,02
Densidad ( $g/cm^3$ )	8,92		
Electrones de valencia	1		
Nº de Avogadro (moléculas/mol)	6,023E+23		
Gamma ( $m^{-3} \cdot eV^{-3/2}$ )	6,82E+27		

# CONDUCCION EN METALES

**Ejercicio 7.** Demostrar que la energía media de los electrones de un metal en el cero absoluto es  $3E_F/5$ .

# CONDUCCION EN METALES



## Resumen de conceptos

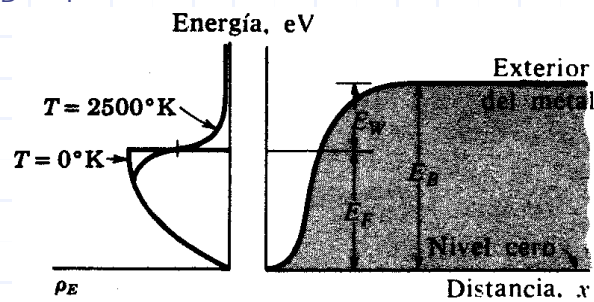
- Los electrones libres en un metal, incluso en el cero absoluto de temperatura ( $0^{\circ}\text{K}$ ), poseen energía, correspondiente al estado cuántico que ocupan.
- Todos los metales poseen un nivel energético característico, *nivel de energía de Fermi* ( $E_F$ ), que determina la probabilidad de que un electrón esté ocupando un estado cuántico de energía  $E$  determinado, según exige el Principio de Incertidumbre.
  - ◆ La probabilidad de que un electrón ocupe este nivel es de  $\frac{1}{2}$ .
  - ◆ En el cero absoluto de temperatura ( $0^{\circ}\text{K}$ ) todos los estados cuánticos de un metal por debajo del nivel de Fermi están ocupados y por encima de este nivel están todos vacíos.
  - ◆ La temperatura favorece a los electrones más rápidos (con mayor energía) y los lleva a ocupar estados cuánticos por encima del nivel de Fermi. De todas formas, la temperatura no afecta a la mayoría de los electrones libres cuyos estados cuánticos están por debajo del nivel de Fermi (Principio "inorgánico de selección natural")
  - ◆ La probabilidad de que un estado cuántico a determinada distancia por encima del nivel de Fermi esté ocupado es la misma de que un estado cuántico por debajo y a la misma distancia anterior del nivel de Fermi esté vacío. Por tanto, las probabilidades de que ambos estados estén ocupados son complementarias.

# CONDUCCION EN METALES

## ◆ Función trabajo de un metal

- Mínima energía que deba comunicarse al electrón más rápido en el cero absoluto de temperatura, para que pueda escapar del metal, superando la barrera de potencial

- $E_W = E_B - E_F$



# CONDUCCION EN METALES

## ◆ Potencial de contacto

- La diferencia de tensión que se genera entre dos puntos muy próximos de los extremos de dos metales unidos mediante una superficie de contacto
- Condición de equilibrio:  $E_{12} = E_{W2} - E_{W1}$

