



# Comportamiento Electrónico de los Materiales

Tema 1. Fundamentos Físicos de la  
Estructura Electrónica del Átomo

➤ **1.1 Fundamentos de la Estructura Atómica de la Materia1.**

➤ **1.1.1 Historia:**

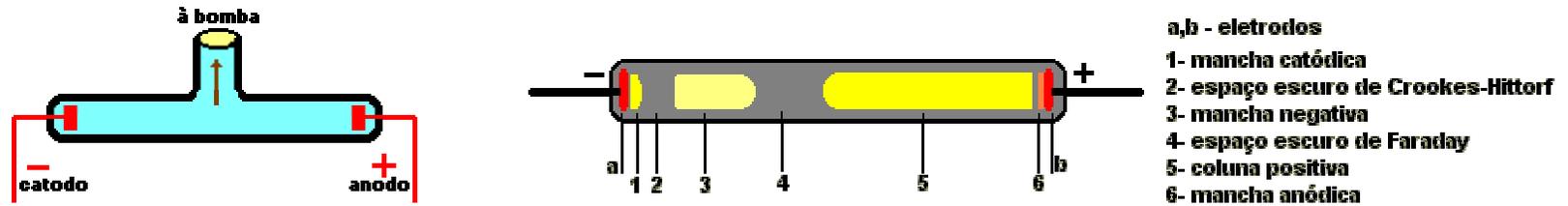
- Se tiene conocimiento desde tiempos antiguos de fenómenos atractivos/repulsivos y de chispas (Electrización) se propuso la existencia de una partícula con carga eléctrica “**electrón**”.
- 1822 Faraday plantea la relación entre fenómenos eléctricos y magnéticos, generó electricidad a partir de magnetismo. Ley de Faraday:

$$V = -\frac{d\phi}{dt}$$

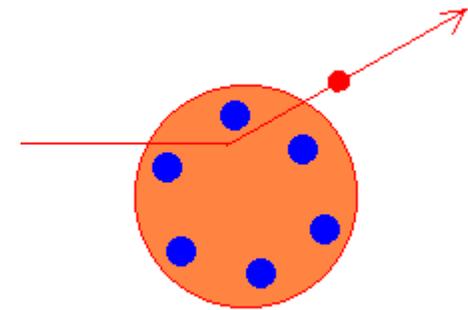
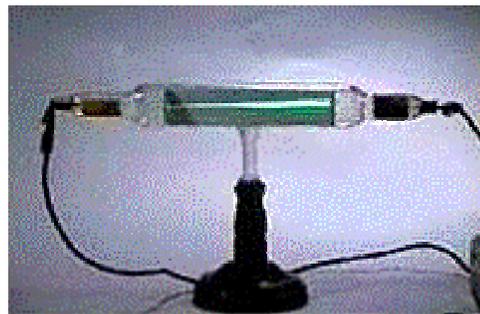
- 1861 Maxwell formula las ecuaciones que describen correctamente los fenómenos electromagnéticos.

$$\nabla \vec{D} = \rho \quad \nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad \nabla \vec{B} = 0 \quad \nabla \times \vec{H} = \vec{J} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}$$

- 1870 Crookes experimenta con tubos de descarga que manifiestan la presencia de carga eléctrica de distintos tipos en los gases a baja presión de 50 a 0.1 mmHg (presión normal -> gases aislantes).

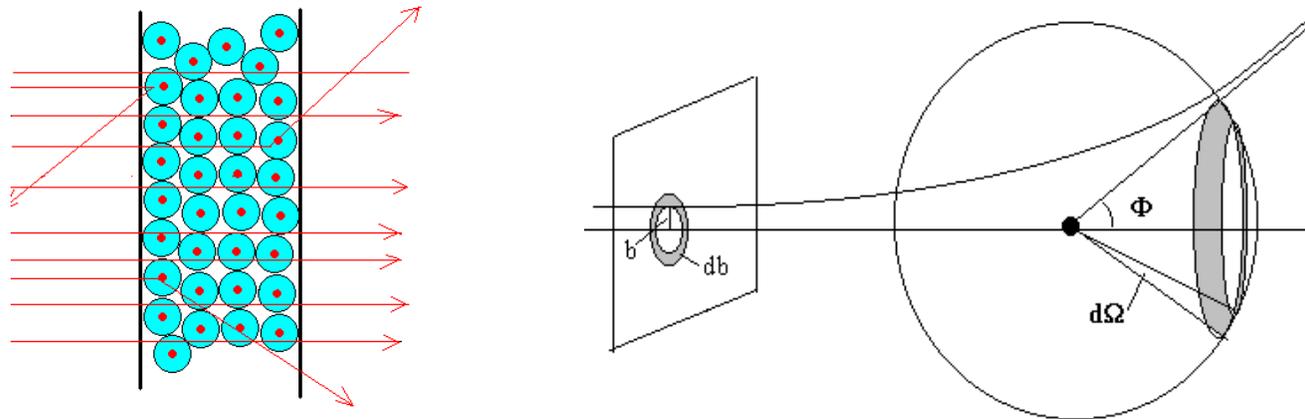


- 1897 Thomson experimenta con rayos catódicos, descubre el electrón como partícula cargada y también los rayos positivos.
- 1900 Max Plank. P.N.F 1918. Energía Cuantizada  $E = n \cdot h \cdot \nu$
- 1904 Thomson plantea un modelo atómico con distribución homogénea de materia. P.N.F 1906.



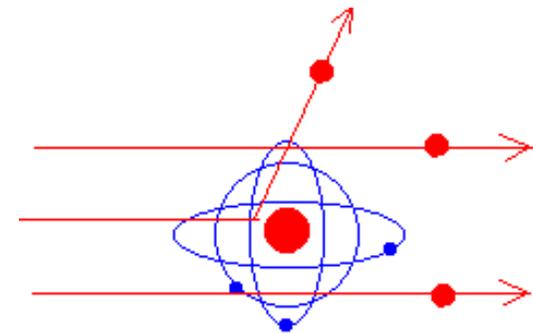
Modelo de Thomson

- 1913 Rutherford explora por primera vez el átomo utilizando partículas alfa e invalida empíricamente el modelo de Thomson.



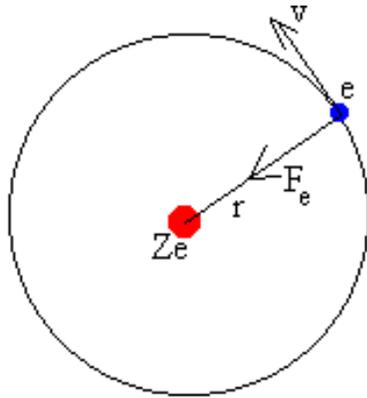
- Rutherford determinó el tamaño del núcleo atómico en el oro= $10^{-12}$ cm frente a los  $10^{-8}$ cm del átomo. P.N.Q. 1919

Propone un modelo atómico basado en un núcleo masivo + y una corteza electrónica lejana del núcleo y muy poco masiva 1% del total



Modelo de Rutherford

- 1914 Bohr basandose en la espectroscopía del hidrógeno desarrolla un modelo atómico que perfecciona y explica el modelo de Rutherford

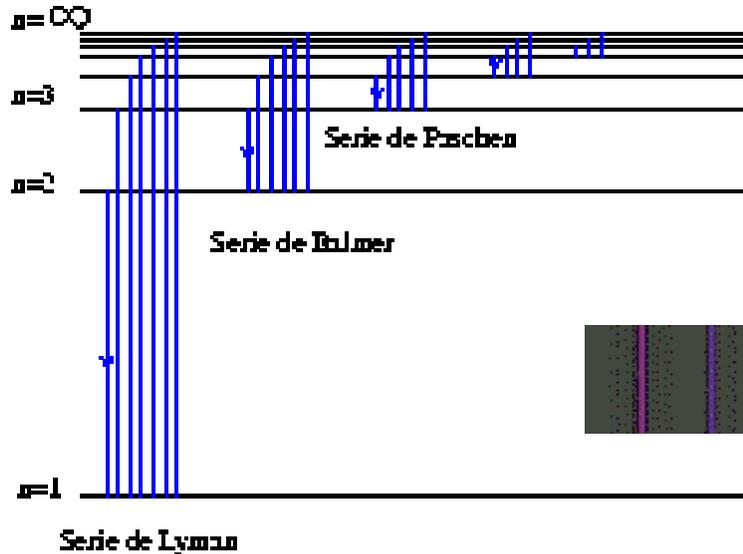


$$m_e \frac{v^2}{r} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}$$

$$L = m_e v r = \frac{n\hbar}{2\pi} \quad \text{con } n = 1, 2, \dots$$

$$E_T = \frac{mZ^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2h^2} \cdot \frac{1}{n^2} \quad \text{Energía total del electrón}$$

- Bohr postuló que los electrones sólo se pueden localizar en trayectorias estables de momento angular múltiplo entero de  $\frac{h}{2\pi} = \hbar$



Las series de emisión del hidrógeno, prueban experimentalmente los postulados de Bohr



➤ El modelo de Bohr perfeccionado por Sommerfeld considerando también órbitas elípticas, sólo podía aplicarse al átomo de hidrógeno. Un nuevo avance es el **Modelo Vectorial del Atomo**.

➤ **Números Cuánticos :**

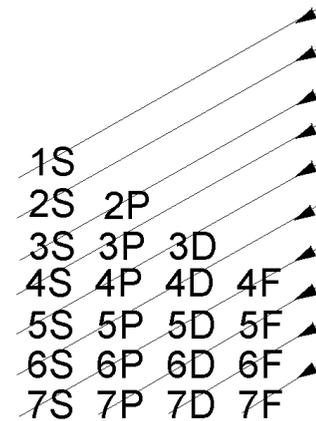
- Principal **N** -> n° de nivel orbital del electrón [1,2,3...]
- Azimutal **L** -> momento angular orbital [ 0,1,2 ..(N-1)]
- Magnético **M** ->orientación del orbital [0," 1," 2..." L]
- Spin **S** -> momento a. Intrínseco [ $+1/2$ ,  $-1/2$ ]
  - Los valores están en función de  $h/2B$
- **Principio de exclusión de Pauli:** Dos electrones en el mismo átomo no pueden tener los mismos números cuánticos.
- **Orbitales:**

<b>Orbital</b>	<b>S</b>	<b>P</b>	<b>D</b>	<b>F</b>
<b>N° electrones</b>	2	6	10	14

➤ **Distribución electrónica de orbitales**

n		l	m	S	n° elect. orb.
K	1	0	0	$\pm \frac{1}{2}$	2 S
L	2	0	0	$\pm \frac{1}{2}$	2 S
		1	+1 0 -1	$\pm \frac{1}{2}$ $\pm \frac{1}{2}$ $\pm \frac{1}{2}$	6 P
M	3	0	0	$\pm \frac{1}{2}$	2 S
		1	-1 ; 0 < 1	$\pm \frac{1}{2}$ $\pm \frac{1}{2}$ $\pm \frac{1}{2}$	6 P
		2	-2 = 1 ; 0 = 1 < 2	" " " "	10 D

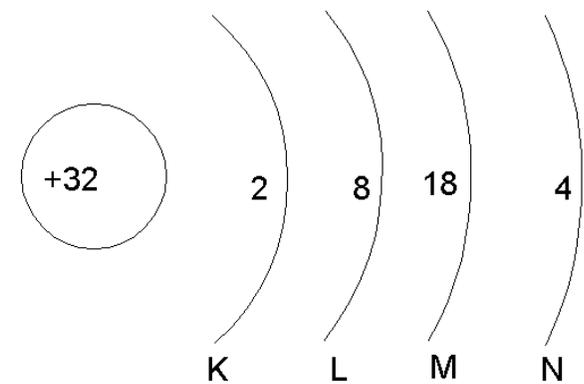
- **Distribución electrónica de un átomo**
- **Orden de llenado. Esquema de Pauli:**



ORDEN DE LLENADO

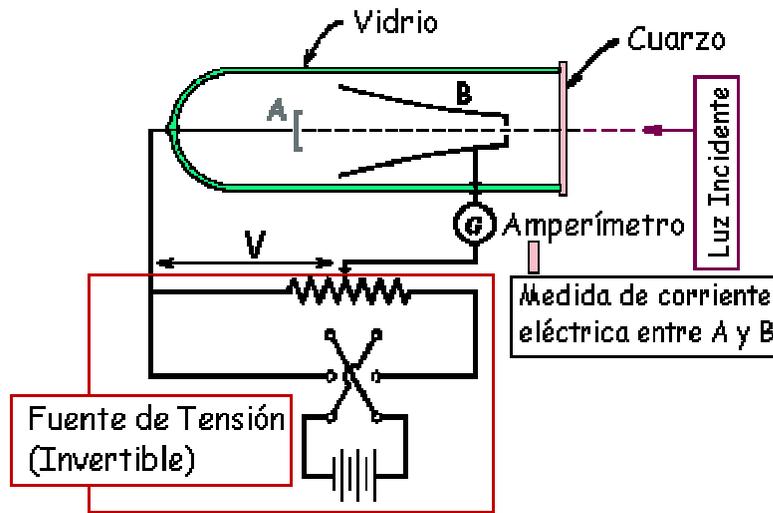
- Ejemplo: Ge [A=72, Z=32, N=41]
- $1S^2 2S^2 2P^6 3S^2 3P^6 3D^{10} 4S^2 4P^2$

4 electrones en su última órbita  
definen sus propiedades  
electrónicas

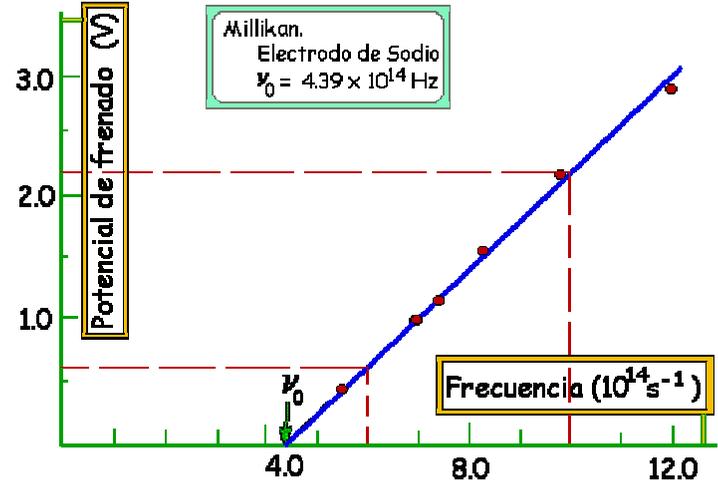
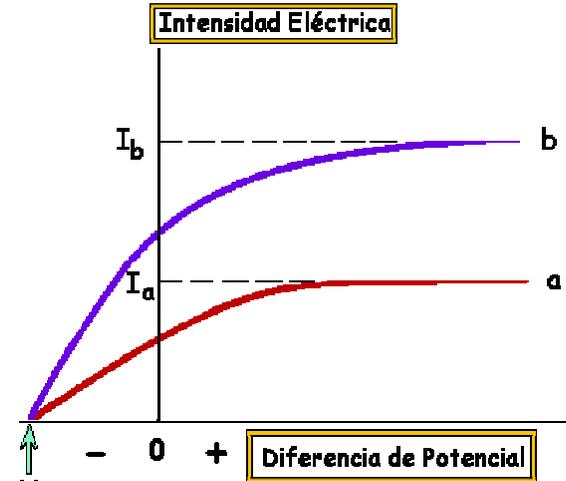


Estructura atómica del Germanio

- Einstein recibe el P.N.F. En 1921 por sus teorías sobre el **efecto fotoeléctrico**. Explica la acción de la luz sobre los electrones y pone de manifiesto nuevamente la cuantización de la energía.



Se prueba que la energía cinética de los electrones es independiente de la intensidad lumínica y si depende de la longitud de onda, o sea de la energía de sus fotones:  $E = h \cdot \nu$



- Investigaciones actuales, física de altas energías.
- CERN - Ginebra



- Dos aceleradores circulares de 7 y 27 Km de circunferencia

➤ CERN. Ginebra



➤ Construcción del túnel.

Tubo de vacío interior

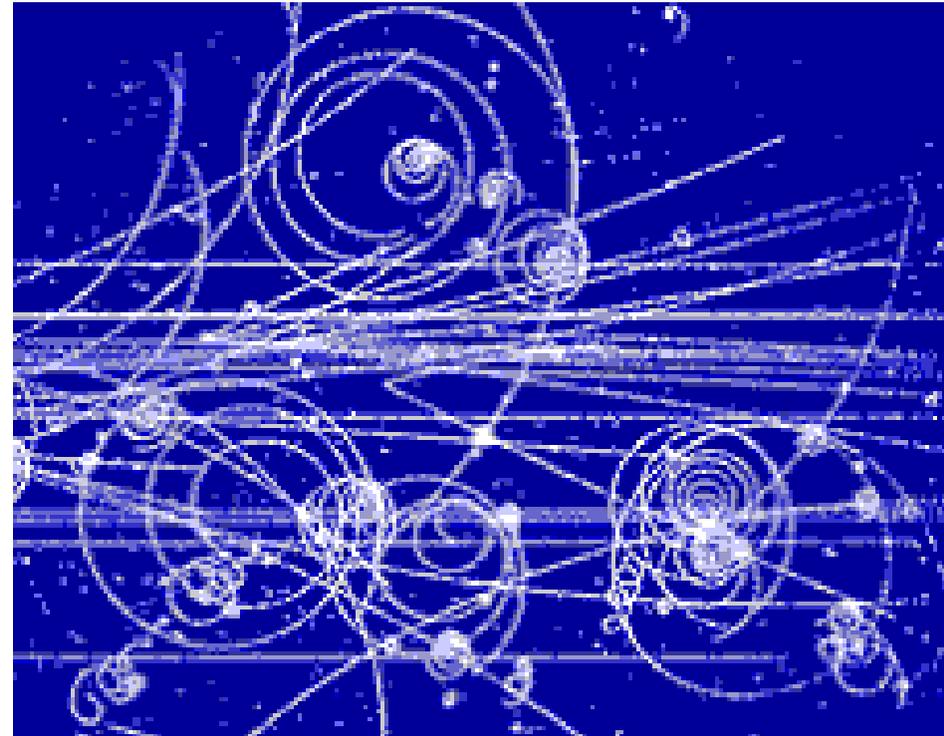
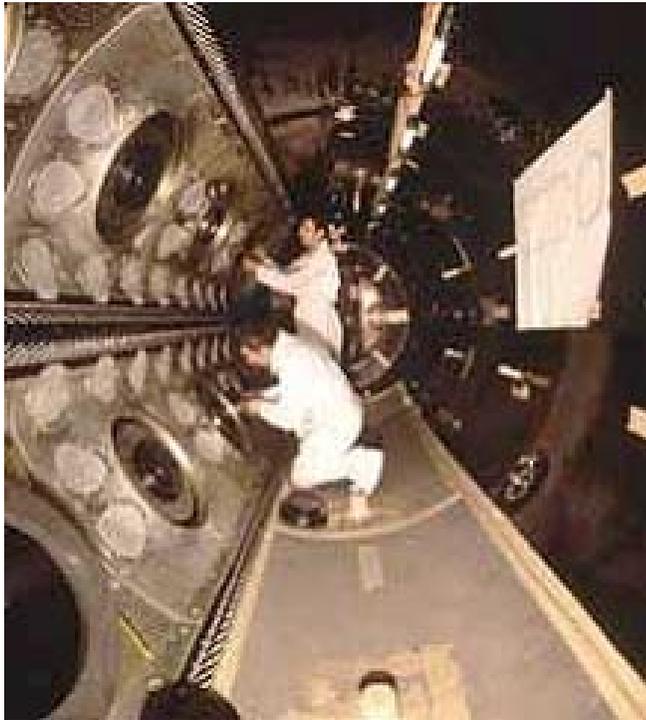
➤ CERN. Ginebra



➤ Interior del Tubo.

Detector ALEPH

➤ CERN. Ginebra

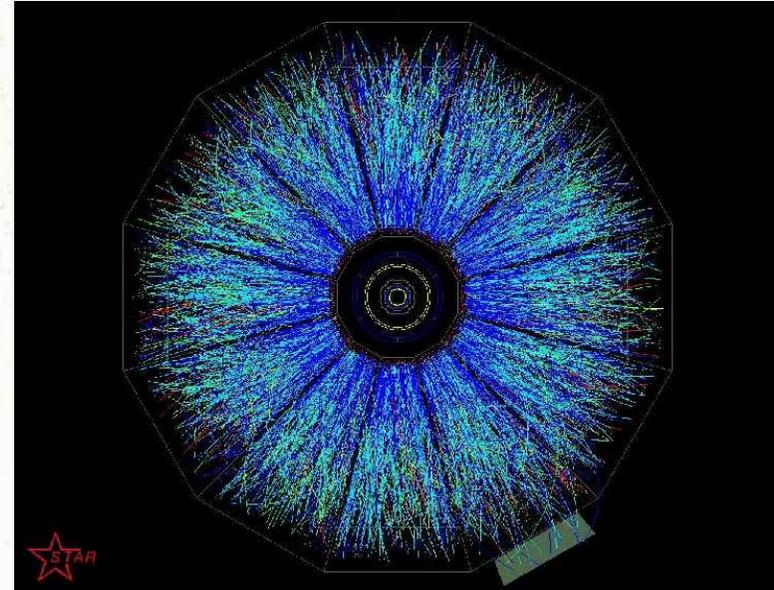
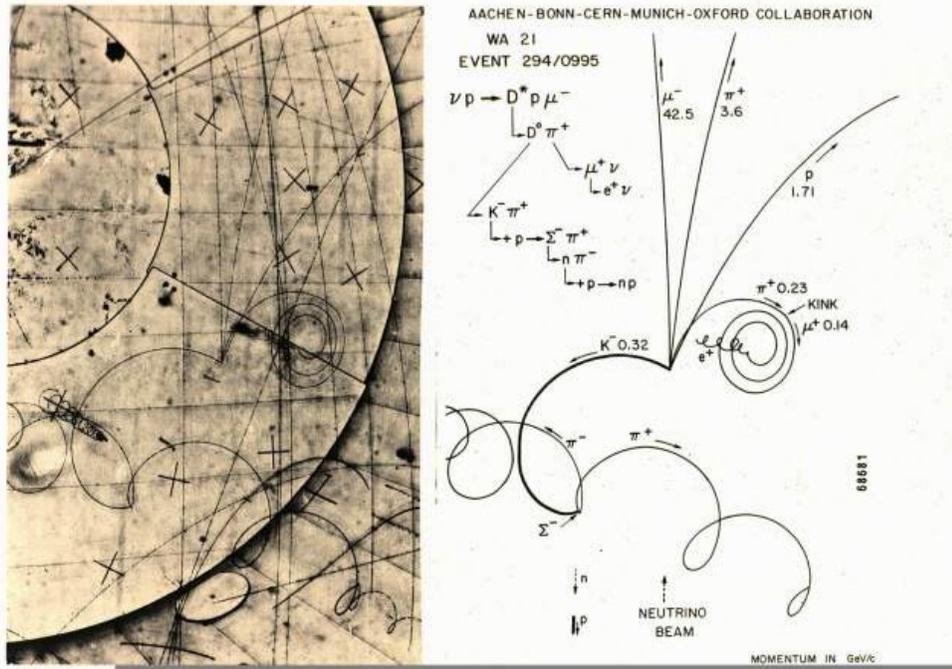


➤ Interior Cámara de Burbujas.

Trazas de una colisión

➤ Identificación de partículas.

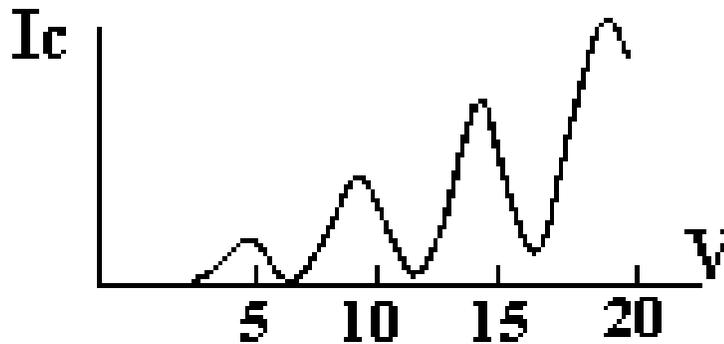
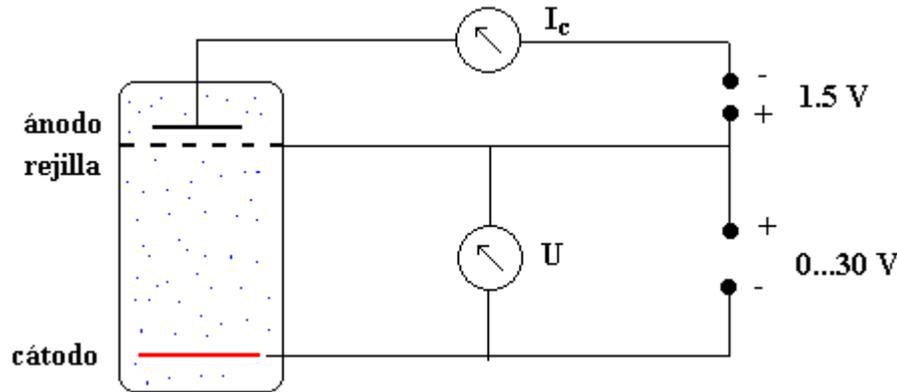
– Ecuación de Lorentz: 
$$\vec{F} = q[\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}]$$



Colisión de núcleos pesados  
en el RHIC New York

Un neutrino (invisible) impacta con un  
protón y se transforma en un muón el protón  
expulsa una serie de mesones  $K^-$ ,  $B^+$ ,  $B^+$

- 1.2 Introducción a la Física Cuántica.
- 1.2.1 Experimento de Frank-Herz



A determinadas energías el gas presenta fuerte absorción, lo cual manifiesta la cuantización en la captura energética.

Este experimento en 1919 supuso la demostración de la reversibilidad en cuanto al intercambio energético cuantizado en los átomos

Ecuación de Einstein:

$$h \cdot \nu = A + \frac{p^2}{2m_e}$$

Ecuación de Plank:

$$E = h \cdot \nu$$

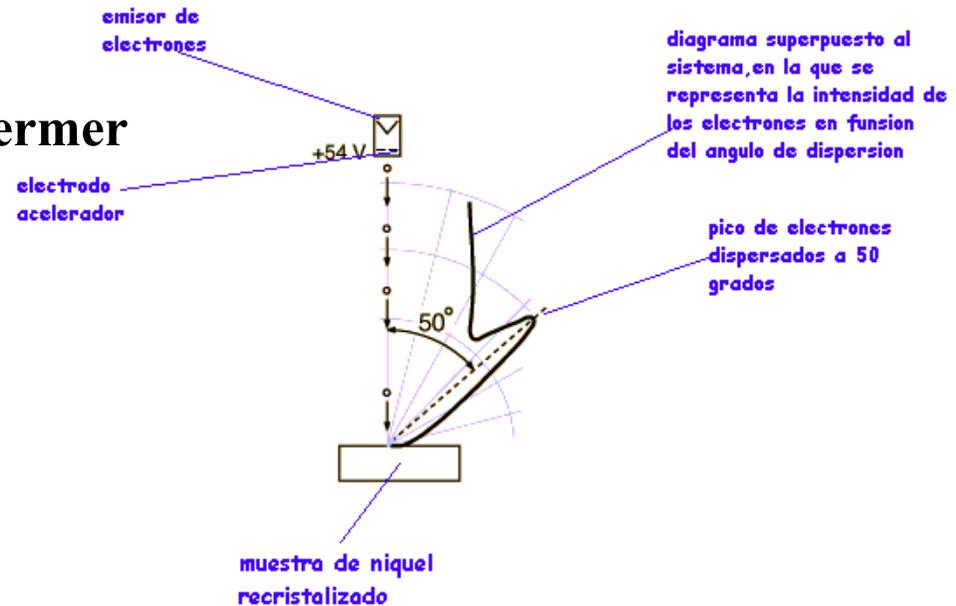
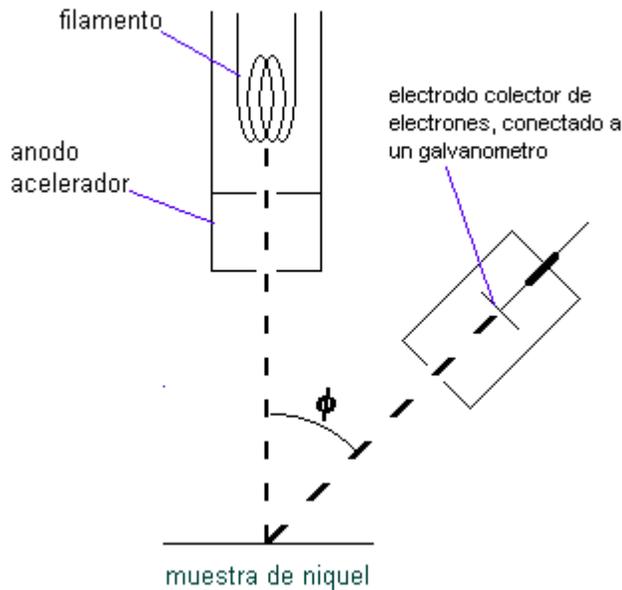
➤ **1.2.2 Mecánica ondulatoria. Hipótesis de De-Broglie.**

- Las partículas (electrón etc) poseen propiedades ondulatorias, al igual que las ondas poseen propiedades corpusculares

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

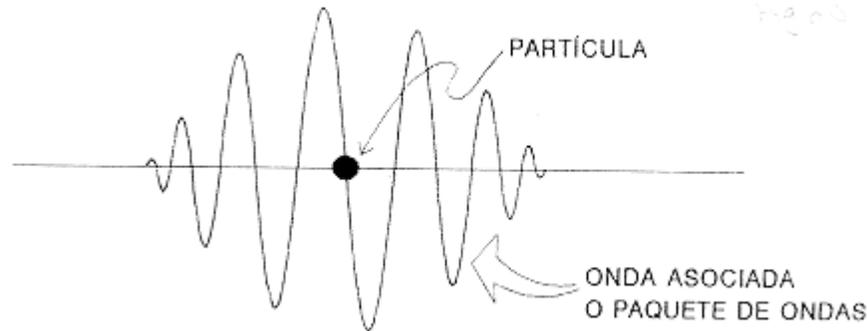
$\lambda$ : longitud de onda de De-Broglie  
 $p$ : impulso de la partícula =  $m \cdot v$

➤ **Experiencia de Davisson y Germer**



Se observó variación en el flujo de electrones en función del ángulo  $\theta$  como consecuencia de la difracción, mostrando naturaleza ondulatoria

### ➤ 1.2.3. Ondas asociadas a las partículas..



### ➤ Concepto de micro-objeto de Heisenberg

#### Dualidad ONDA-PARTICULA

- Los micro-objetos (electrones, fotones) presentan propiedades duales: corpusculares y ondulatorias.
- La localización de un micro-objeto correspondiente a una onda no puede ser definida con precisión (principio de incertidumbre de Heisenberg) debido a que la onda se distribuye en el espacio.

### ➤ Concepto de Función de Onda de Max Born.

- $P = [Q^2(x, y, z)]$  La probabilidad de encontrar una partícula en un determinado punto del espacio es proporcional al cuadrado del valor absoluto de su función de onda.

➤ **Concepto de función de onda**

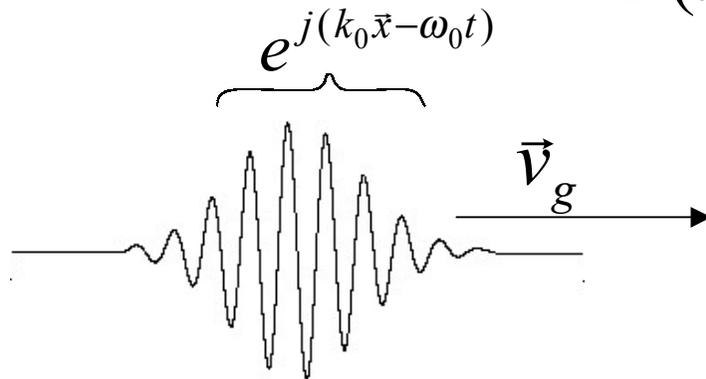
- Energía de una onda :  $E = h \cdot \nu = h \cdot \omega$        $E = \frac{p^2}{2m}$

- Momento de una onda :  $\vec{p} = h \cdot \vec{k}$       Número de onda:  $k = \frac{2\pi}{\lambda}$

- Función de onda :  $\Psi(\vec{x}, t)$

- Onda asociada a una partícula libre de momento  $p$  y energía  $E$  :  $\Psi(\vec{x}, t) = A \cdot e^{j(\vec{k}\vec{x} - \omega t)}$        $\left| \begin{array}{l} k = \frac{p}{h} \\ \omega = \frac{E}{h} \end{array} \right.$

- En localizaciones finitas:  $\Psi(\vec{x}, t) \approx \Phi(x - \vec{v}_g t) \cdot e^{j(k_0 \vec{x} - \omega_0 t)}$



$V_g$  = velocidad de grupo

$\vec{v}_0 = \frac{\vec{p}_0}{m}$       Velocidad central (de la partícula)

➤ 1.2.4. Ecuación de Schrödinger.

$$E(t) = -\frac{\hbar\partial}{j\partial t}$$

$$p(x) = \frac{\hbar\partial}{j\partial x}$$

– Energía total de un micro-objeto:  $E = E_p + \frac{p^2}{2m}$

– Expresión cuántica para  $E_p$  constante:  $-\frac{\hbar\partial}{j\partial t} = E_p(x) + \frac{1}{2m} \left[ \frac{\hbar\partial}{j\partial x} \right]^2$

– Ecuación de Schrödinger en el espacio:

$$\frac{\hbar\partial\Psi(x,t)}{j\partial t} = E_p(x)\Psi(x,t) - \frac{\hbar^2\partial^2\Psi(x,t)}{2m \cdot \partial x^2}$$

– Soluciones dependientes del tiempo o del espacio:

$$\Psi(x,t) = \Phi(x) \cdot f(t)$$

$\Phi(x)$  depende del espacio,  $f(t)$  depende del tiempo.

$$j\hbar \cdot \Phi(x) \frac{\partial f(t)}{\partial t} = E_p \cdot \Phi(x) f(t) - \frac{\hbar^2 f(t)}{2m} \nabla^2 \Phi(x)$$

- **Ecuación de Schrödinger.**

$$j\hbar \cdot \frac{\partial f(t)}{\partial t} = E_P - \frac{\hbar^2}{2m \cdot \Phi(x)} \nabla^2 \Phi(x)$$

- **Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo:**

$$E_P - \frac{\hbar^2}{2m \cdot \Phi(x)} \frac{d^2 \Phi(x)}{dx^2} = C_0$$

- **Ecuación de Schrödinger independiente del espacio:**

$$j\hbar \cdot \frac{\partial f(t)}{\partial t} = C_0 \Rightarrow \frac{df(t)}{dt} = \frac{C_0}{j\hbar} f(t)$$

➤ **Solución Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para una partícula libre:**

- Una partícula es libre si no está afectada de campos externos, por lo tanto su energía potencial es cero.

$$-E_c = \frac{\hbar^2}{2m \cdot \Phi(x)} \frac{\partial^2 \Phi(x)}{\partial x^2}$$

$$\frac{\partial^2 \Phi(x)}{\partial x^2} = -\frac{2mE_c}{\hbar^2} \Phi(x) \quad \text{como} \quad K^2 = \frac{2mE_c}{\hbar^2}$$

$$\frac{\partial^2 \Phi(x)}{\partial x^2} = -K^2 \Phi(x)$$

- La solución :

$$\Phi(x) = Ae^{jKx} + Be^{-jKx} \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

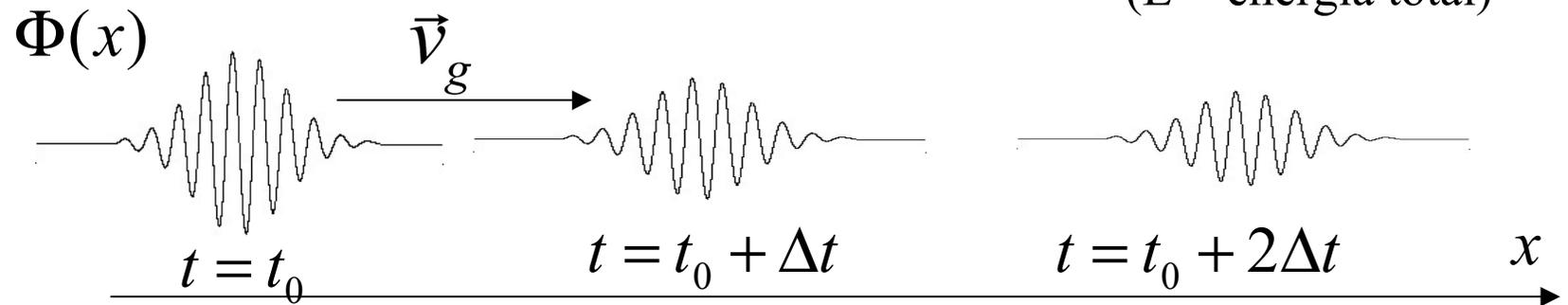
- Interpretación de la solución de la Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para una partícula libre:

$$\Phi(x) = Ae^{jKx} + Be^{-jKx}$$

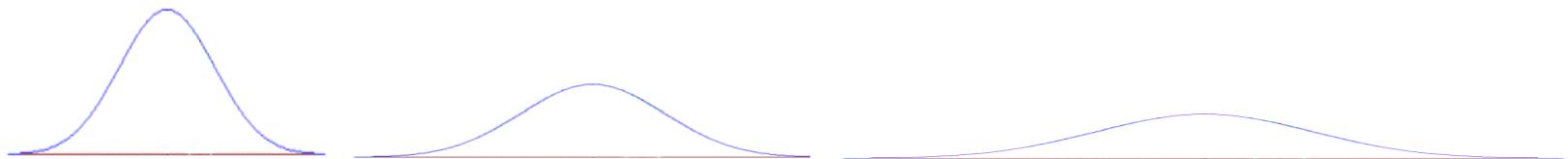
Onda viajera

$$\Psi(x, t) = \Phi(x) \cdot e^{-\frac{jEt}{\hbar}}$$

Añadiendo solución de ecuación temporal (E = energía total)

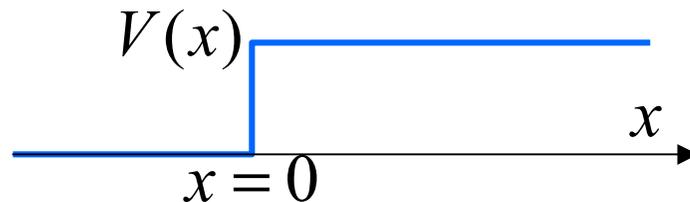


$$P(x) = \Psi \cdot \Psi^*$$



La probabilidad se desvanece conforme aumenta x

- 1.3 Partículas frente a escalones, barreras y pozos de potencial.
  - 1.3.1 Potencial escalón (electrones de conducción etc.)



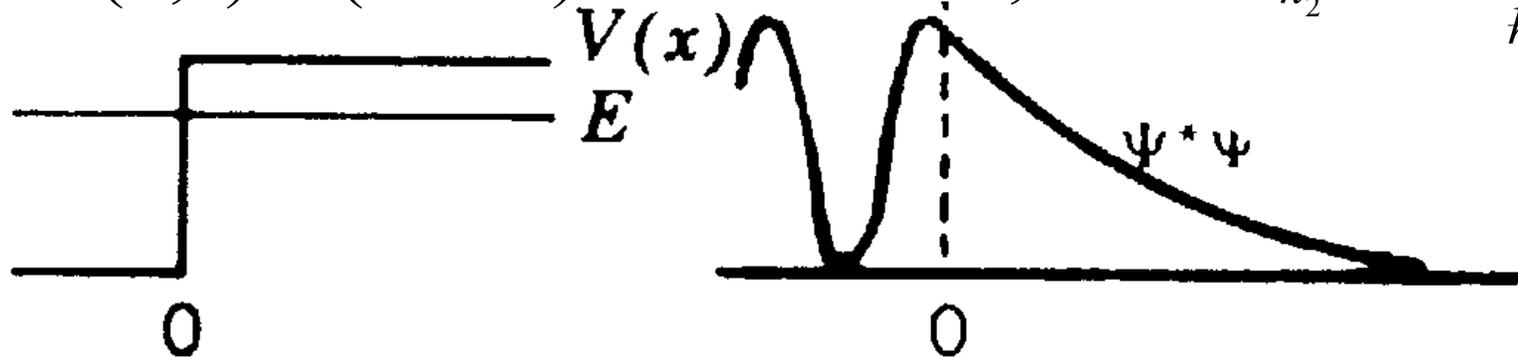
Escalón de potencial

Dos posibilidades: la energía de la partícula puede ser superior o inferior a la cima del escalón.

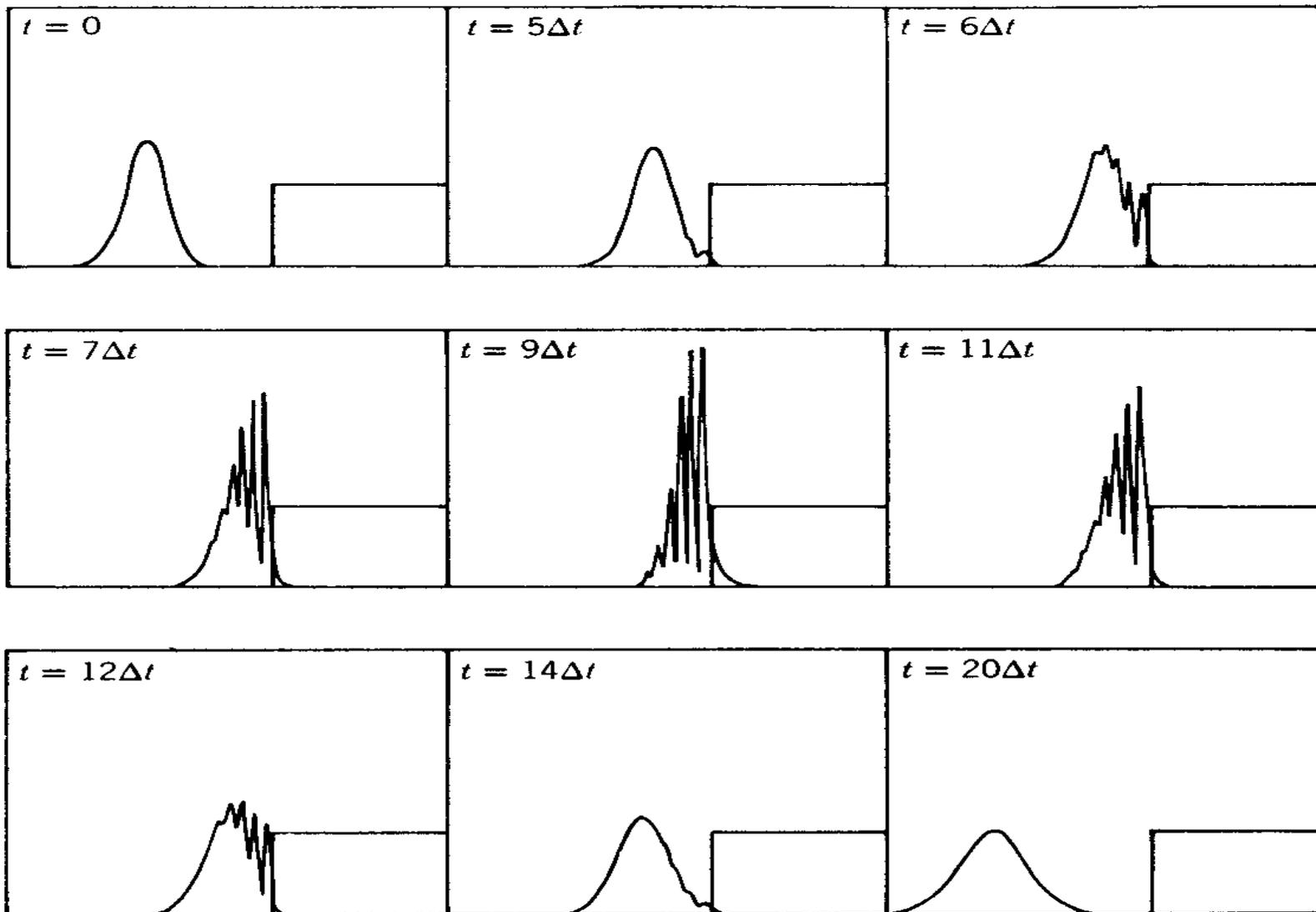
**Energía de la partícula inferior a la cima del escalón:**

$$\Psi(x, t) = Ae^{j(Kx - Et/\hbar)} + Be^{j(-Kx - Et/\hbar)}; x \leq 0 \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\Psi(x, t) = (A + B) \cdot e^{-k_2 x} \cdot e^{-jEt/\hbar}; x \geq 0 \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$



➤ -Energía de la partícula inferior a la cima del escalón:  
Choque de una partícula libre con un escalón de potencial



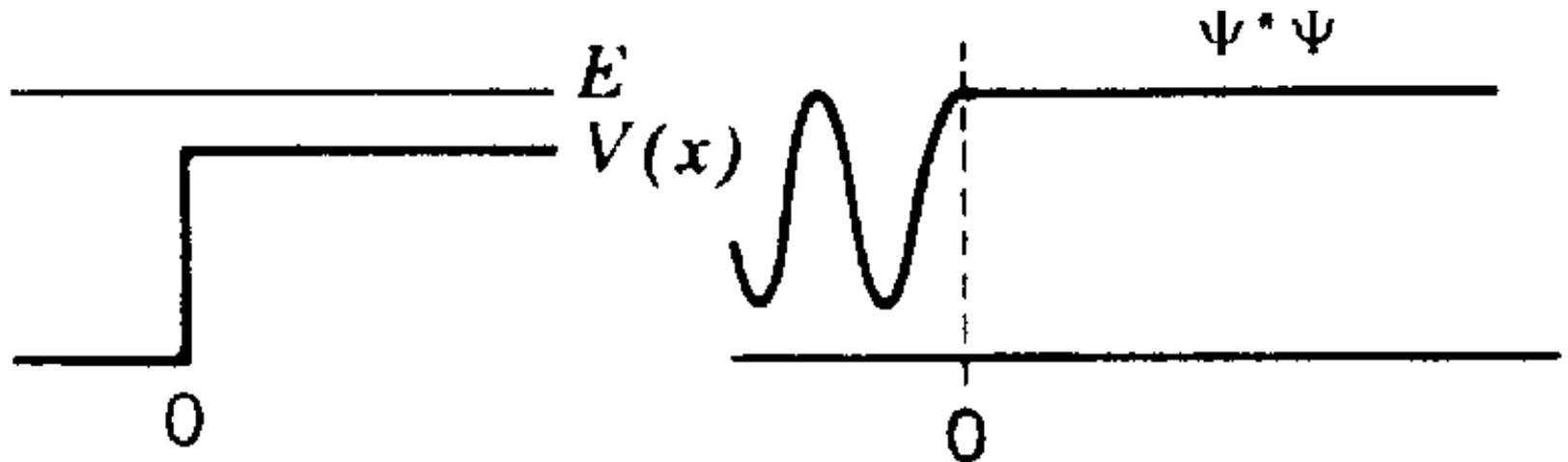
➤ **Energía de la partícula superior a la cima del escalón:**

$$\Phi(x) = Ae^{jKx} + A \frac{k - k_2}{k + k_2} \cdot e^{-jKx}; x \leq 0$$

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{h}$$

$$\Phi(x) = A \frac{2k}{k + k_2} \cdot e^{jK_2x}; x \geq 0$$

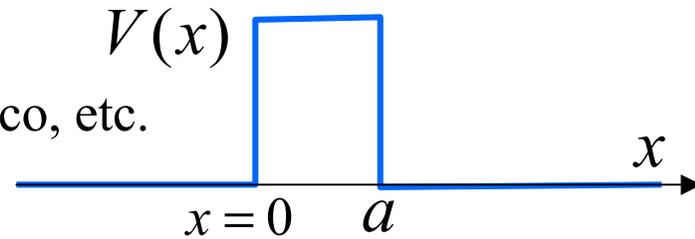
$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{h}$$



Tras una perturbación la partícula sigue su camino

➤ **1.3.2 Barrera de potencial .**

- Electrones en campo eléctrico, etc.



Dos posibilidades: la energía de la partícula puede ser superior o inferior a la cima de la barrera.

**Energía de la partícula inferior a la cima de la barrera:**

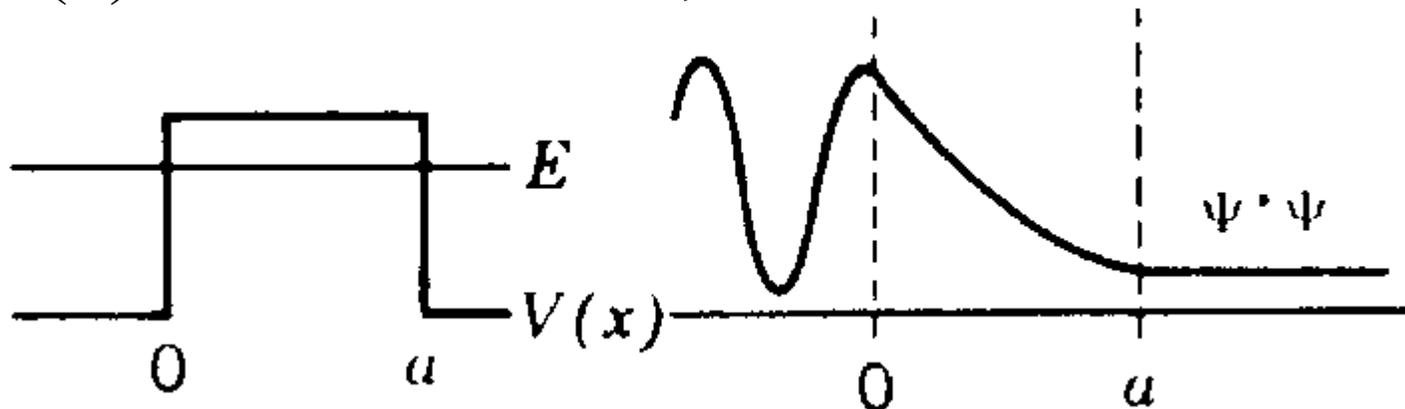
$$\Phi(x) = Ae^{jKx} + Be^{-jKx}; x \leq 0$$

$$\Phi(x) = Fe^{jK_2x} + Ge^{-jK_2x}; 0 \leq x \leq a$$

$$\Phi(x) = Ce^{jKx} + De^{-jKx}; x \geq a$$

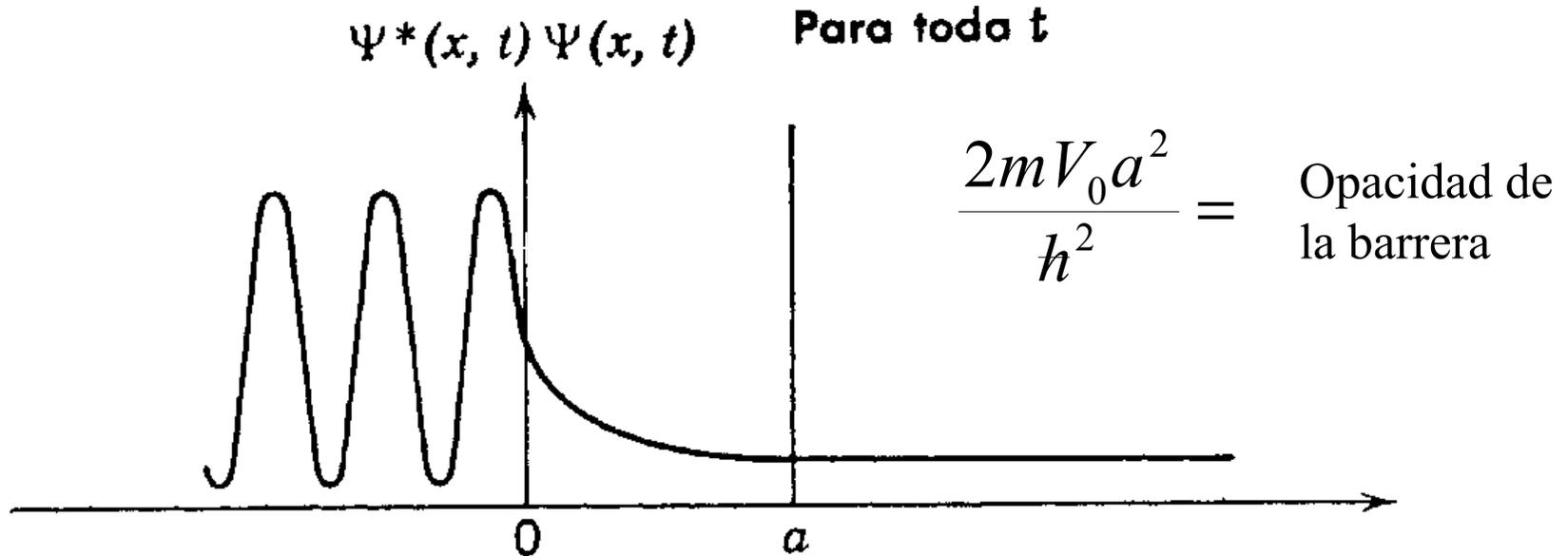
$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$



## ➤ Efecto Tunel.

- Si la probabilidad al otro lado de la barrera es distinta de cero hay partículas que la traspasan sin superar su energía.



Un dato de sumo interés es el cociente entre las probabilidades a ambos lados de la barrera, se denomina coeficiente de transmisión T:

$$T \approx 16 \frac{E}{V_0} \left( 1 - \frac{E}{V_0} \right) \cdot e^{-2aK_2} \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{h}$$

➤ **Barrera de potencial .**

**Energía de la partícula superior a la cima de la barrera:**

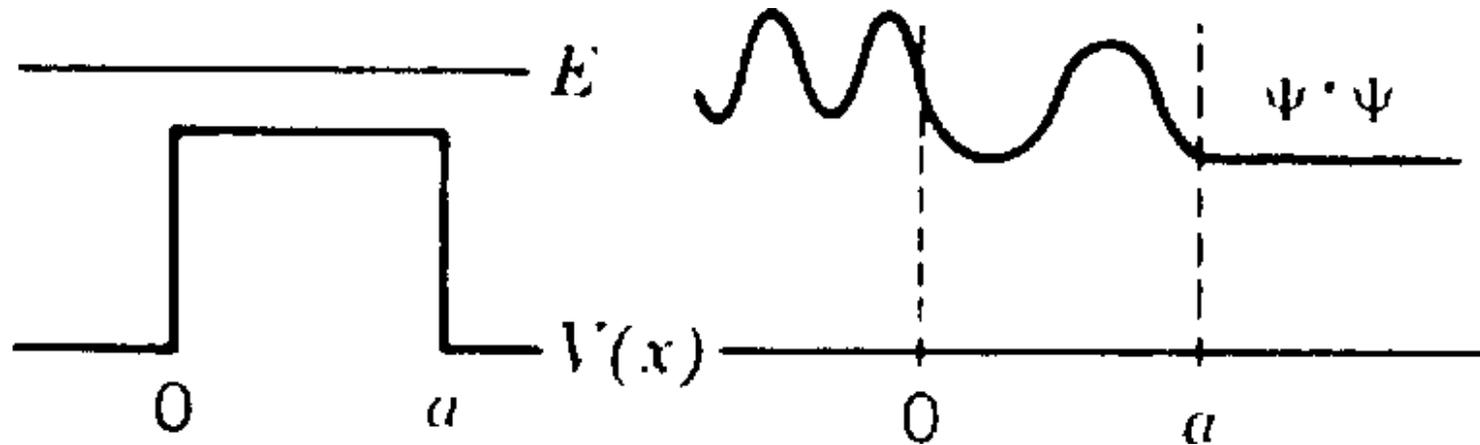
$$\Phi(x) = Ae^{jKx} + Be^{-jKx}; x \leq 0$$

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\Phi(x) = Fe^{jK_3x} + Ge^{-jK_3x}; 0 \leq x \leq a$$

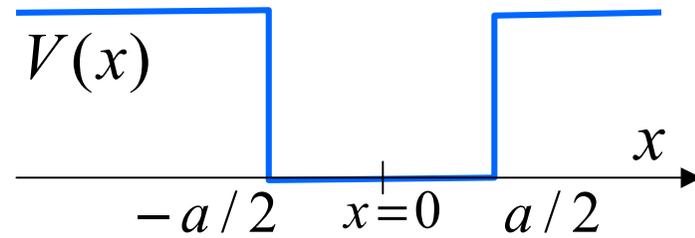
$$k_3 = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}$$

$$\Phi(x) = Ce^{jKx} + De^{-jKx}; x \geq a$$



Tras una perturbación la partícula sigue su camino

➤ 1.3.3 Pozo de potencial .



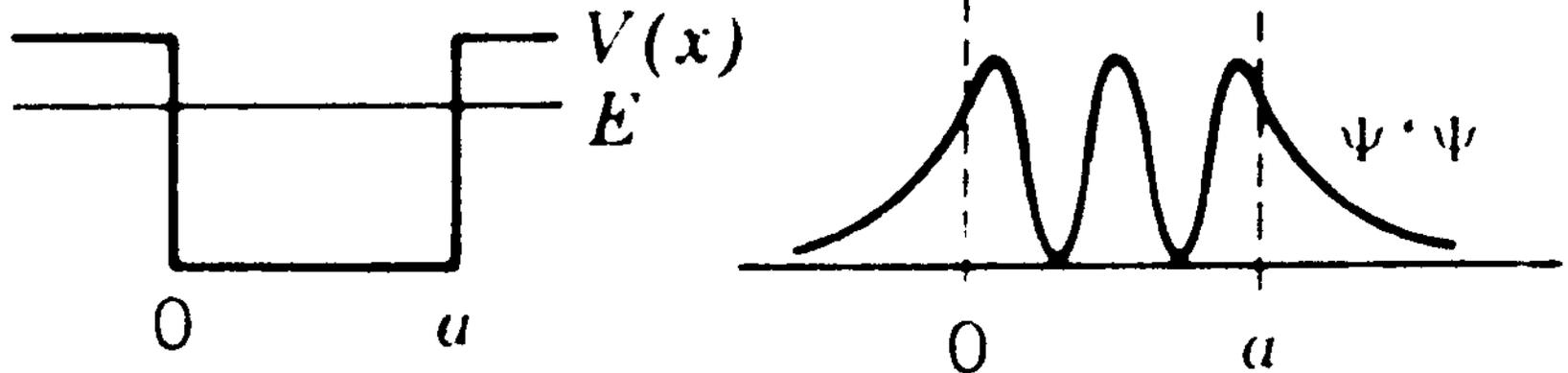
Dos posibilidades: la energía de la cima del pozo puede ser finita o infinita.

**Pozo de energía finita** (neutrón ligado a un núcleo):

$$\Phi(x) = Ce^{K_2x} + De^{-K_2x}; x \leq -a/2$$

$$\Phi(x) = Fe^{K_2x} + Ge^{-K_2x}; x \geq a/2$$

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{h}$$



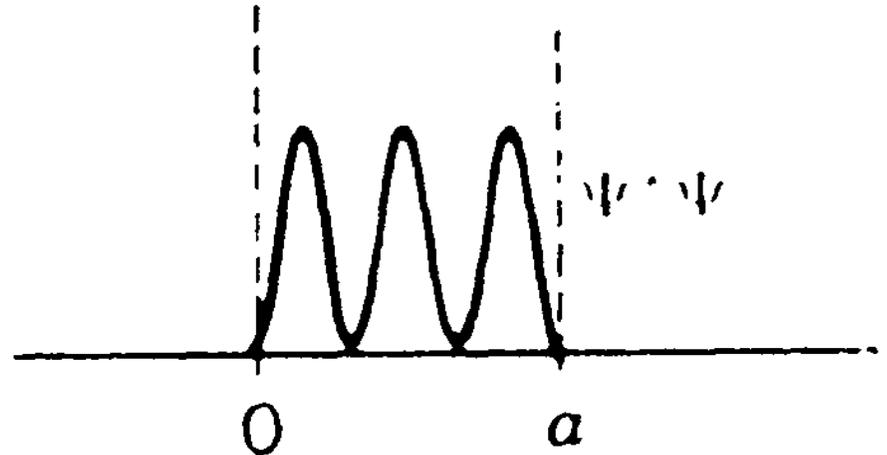
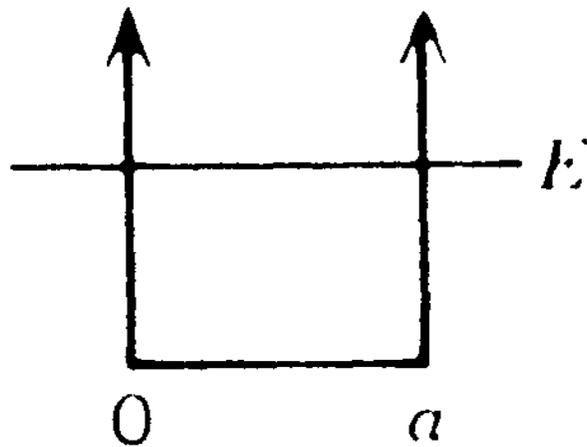
La partícula goza de cierta libertad en el pozo.

➤ 1.3.3 Pozo de potencial .

Pozo cuadrado de energía infinita (molécula anclada en un cristal):

$$\Phi(x) = B_n \cos(k_n x); k_n = \frac{n\pi}{a}; n = 1,3,5..$$

$$\Phi(x) = A_n \text{sen}(k_n x); k_n = \frac{n\pi}{a}; n = 2,4,6.$$



La partícula no puede rebasar los límites del pozo.