

Comportamiento Electrónico de los Materiales

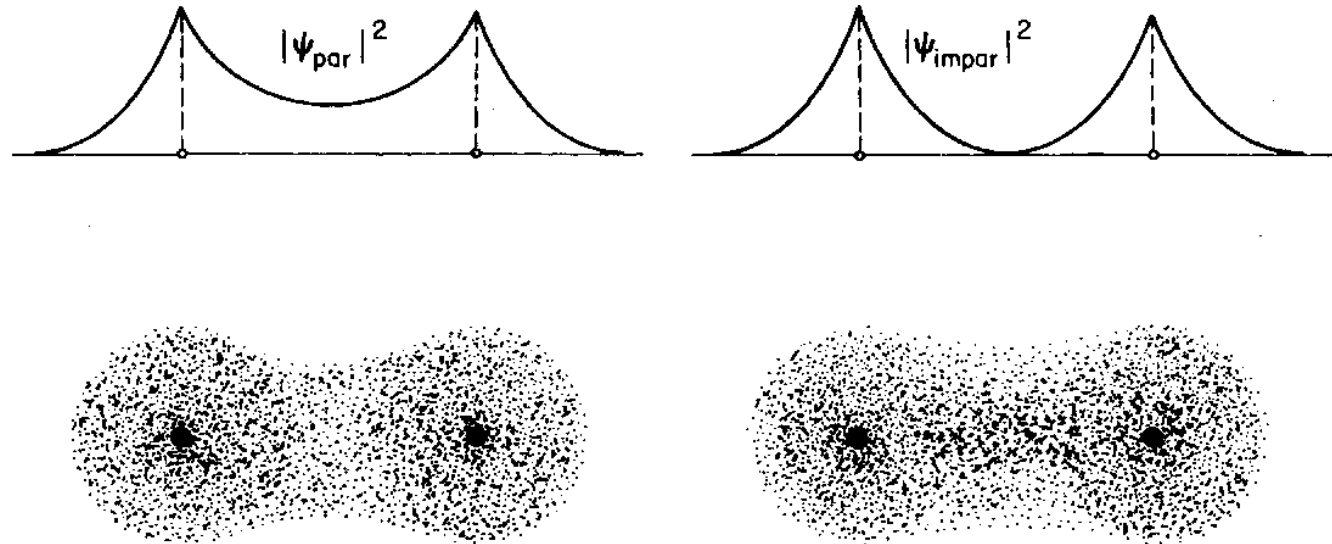
Tema 2. Electrones en Sólidos.
Teoría de Bandas de Energía.

➤ **2.1 Teoría de Bandas de Energía.**

➤ **2.1.1 Partículas en interacción con objetos múltiples.**

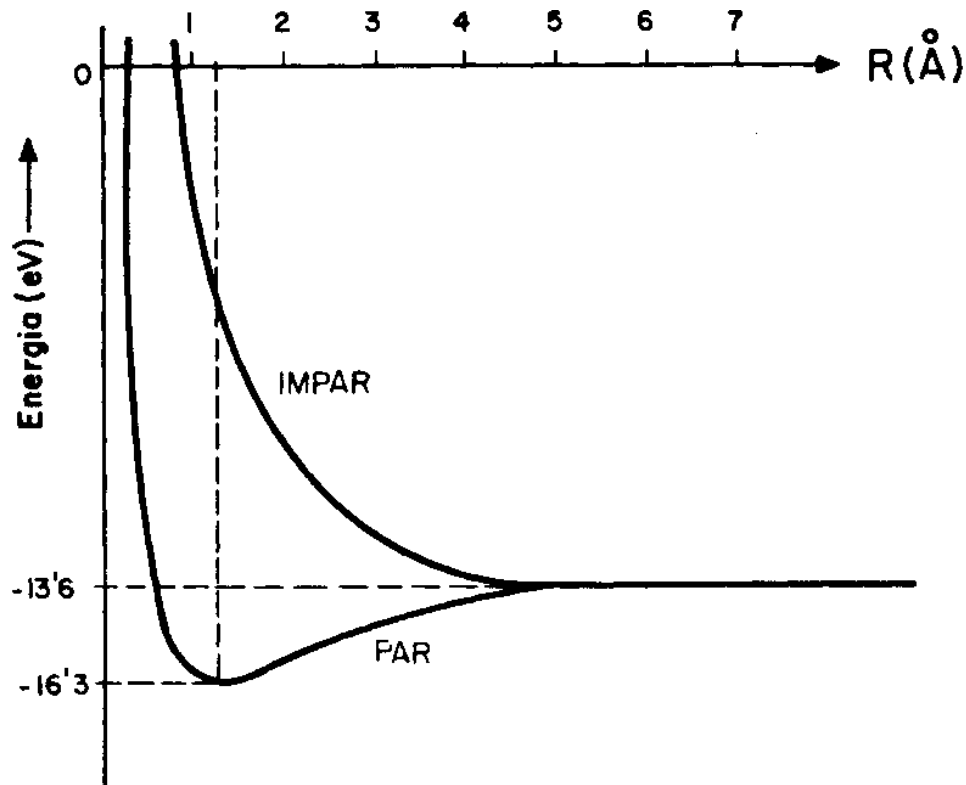
– **Molécula de Hidrógeno.**

- Los electrones ya no se comportan como en un solo pozo de potencial, al haber dos estructuras acopladas.



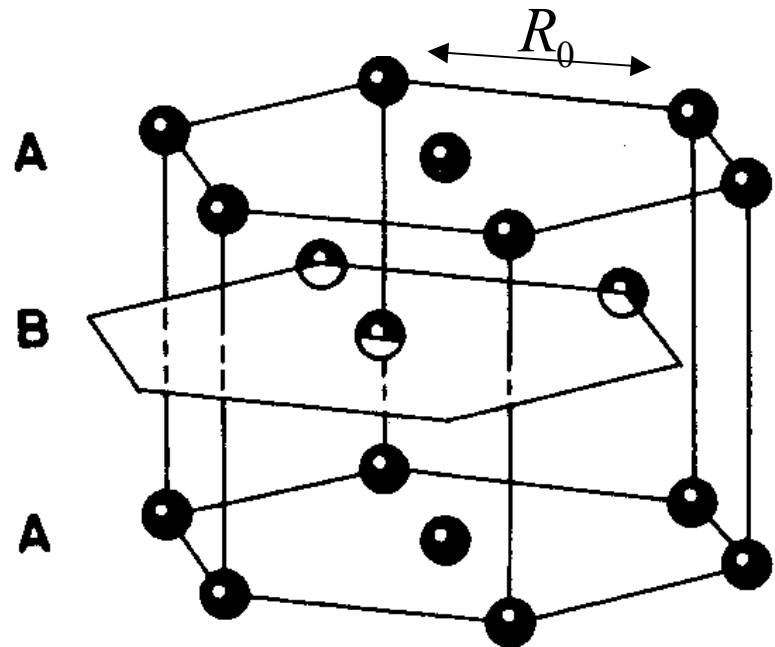
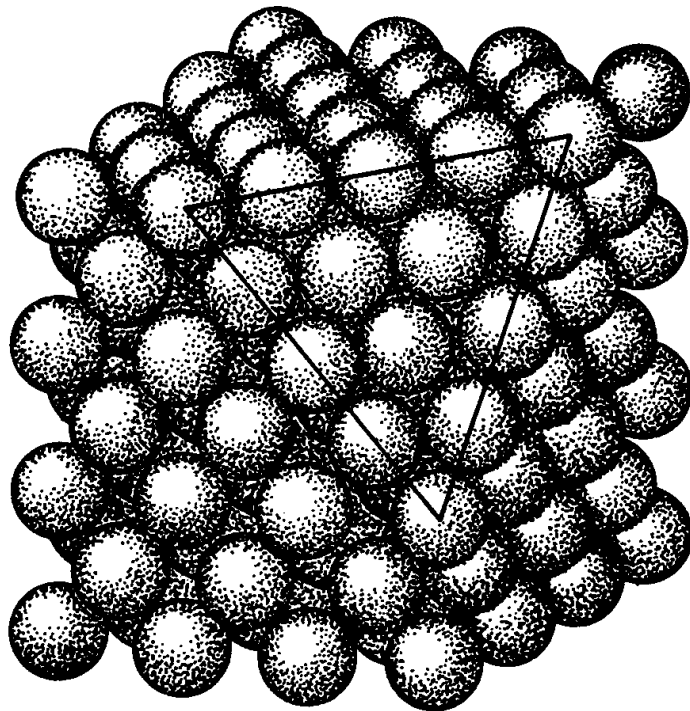
La probabilidad de encontrar un electrón se reparte entre los dos núcleos. Entre las dos posibilidades de la función de onda, la par forma una molécula, la impar no. La energía de enlace del hidrógeno es de 2.65 eV.

- Partículas en interacción con objetos múltiples.
 - Molécula de Hidrógeno.



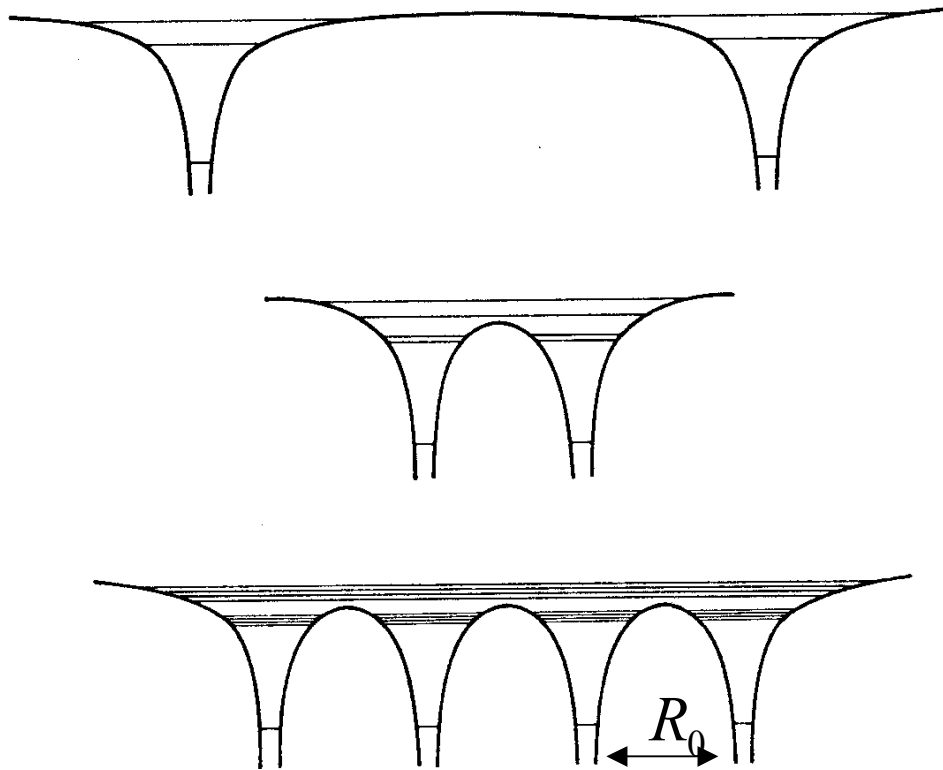
Conforme se acercan dos átomos se produce un desdoblamiento de los estados energéticos permitidos debido a la interacción de los electrones, la diferencia de energía entre el estado fundamental aislado y el estado ligado es la energía de enlace molecular: 2.65 eV para el hidrógeno.

➤ 2.1.2 Red cristalina..



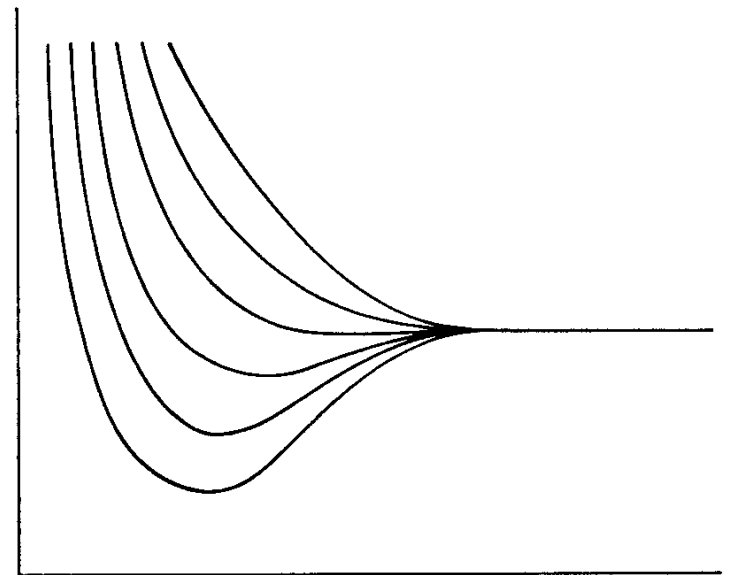
Un conjunto ordenado de átomos o moléculas ancladas entre sí por medio de energía de enlace constituye una red cristalina sólida. La distancia de separación entre objetos se denomina radio interatómico natural R_0 .

➤ **Desdoblamiento en Múltiples de niveles en una red cristalina.**

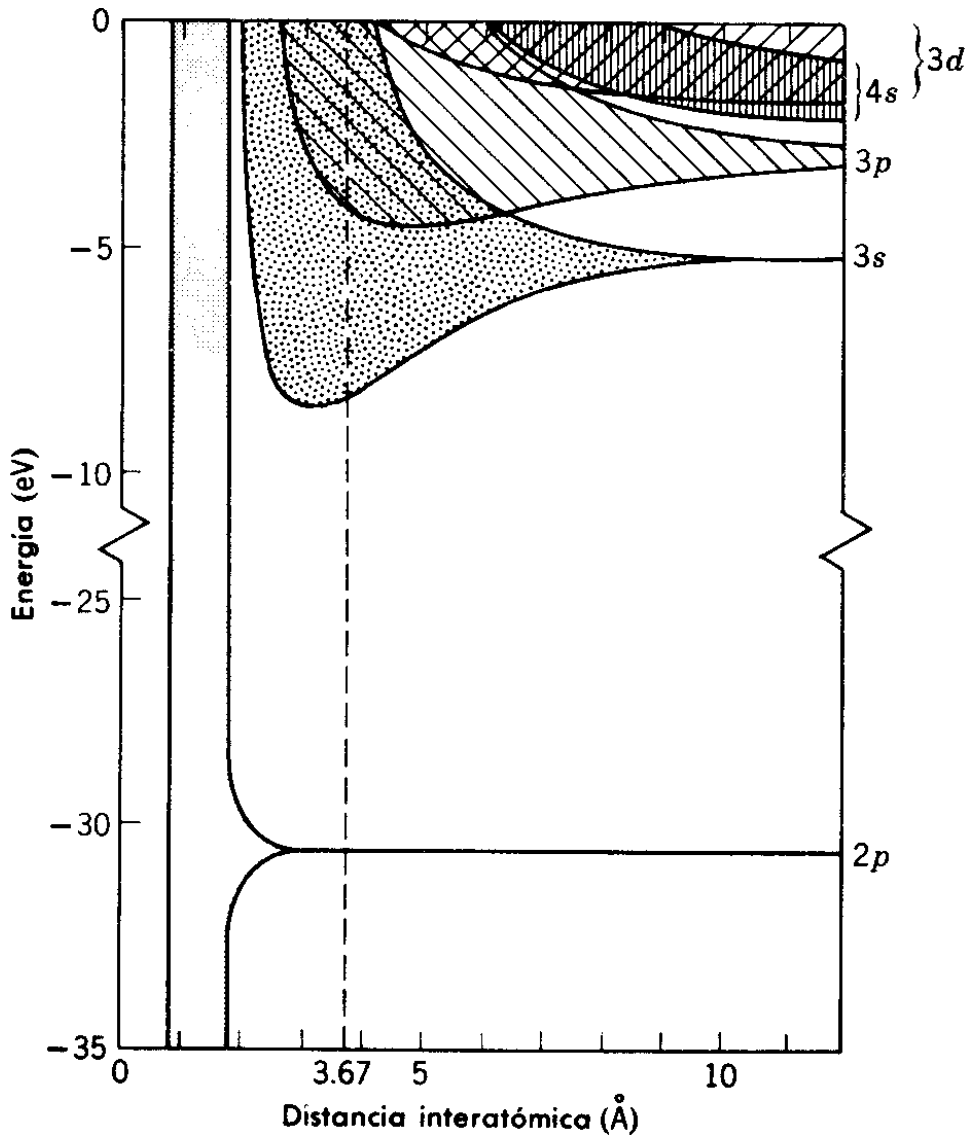


Al acercar dos átomos
aumenta el número de
niveles energéticos
permitidos

Cuatro dos átomos juntos
generan muchos número
de niveles permitidos.



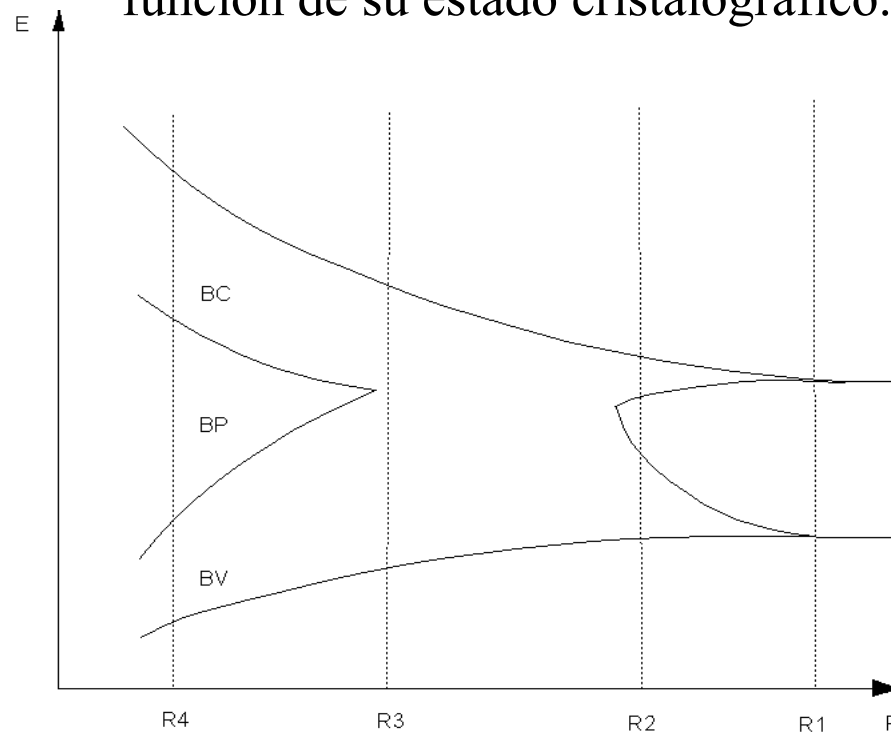
➤ **Desdoblamiento de Niveles en Bandas de energía en una red.**



En una red cristalina completa la interacción de los electrones con los átomos circundantes en el cristal produce un desdoblamiento en tantos niveles energéticos permitidos que tienen estructura de banda continua. Básicamente se denomina banda de valencia a la correspondiente a los electrones de valencia (reacciones químicas)

2.1.3 Diagrama de Bandas de Energía

El carbono presenta diversas estructura de bandas de energía en función de su estado cristalográfico.



SOLUCION DE LA ECUACION DE SCHRÖDINGER PARA EL ATOMO DE C.

La solución de la ecuación de Schrödinger para el carbono presenta desdoblamiento de niveles permitidos en bandas y para algunas distancias interatómicas, presenta solapamiento de bandas.

En los estados cristalinos que corresponden con una distancia interatómica en la cual hay solapamiento entre la banda de valencia y la banda de conducción el carbono es un conductor eléctrico: grafito ($R = R_3$).

Los sólidos se pueden caracterizar por su diagrama de bandas de energía

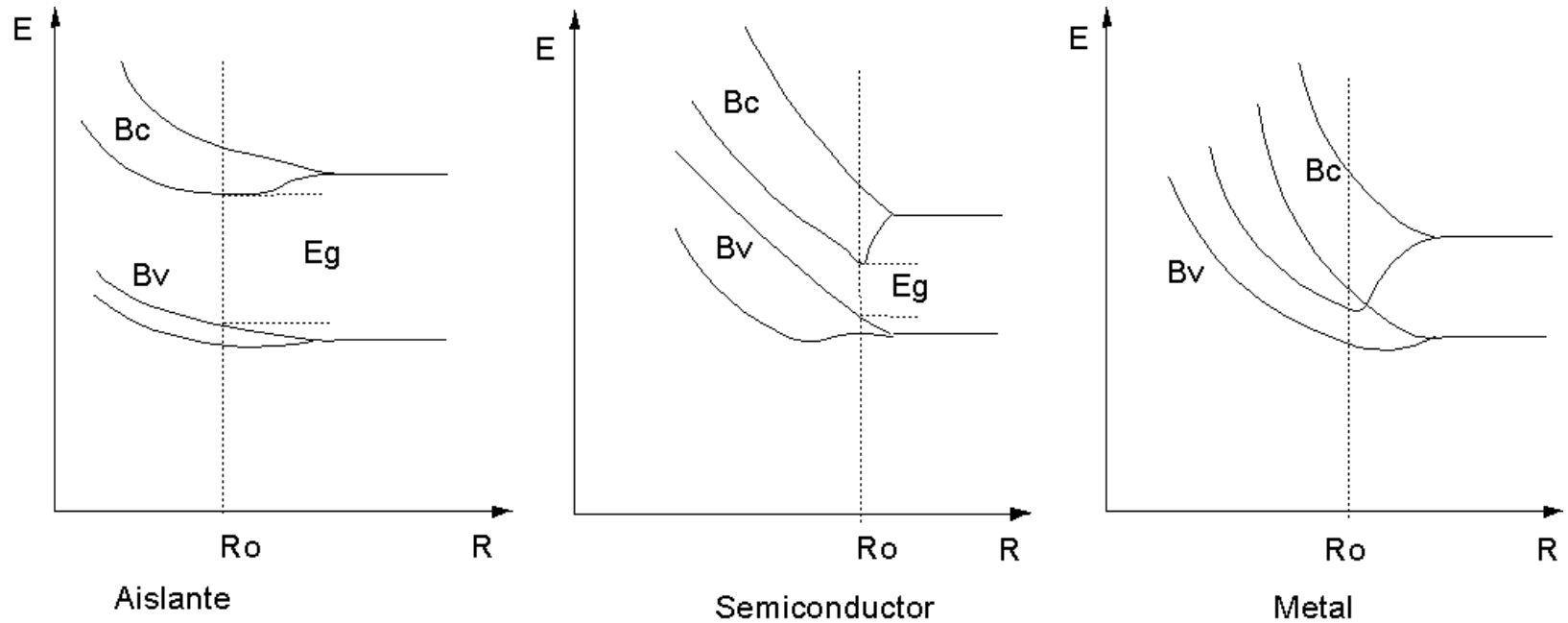
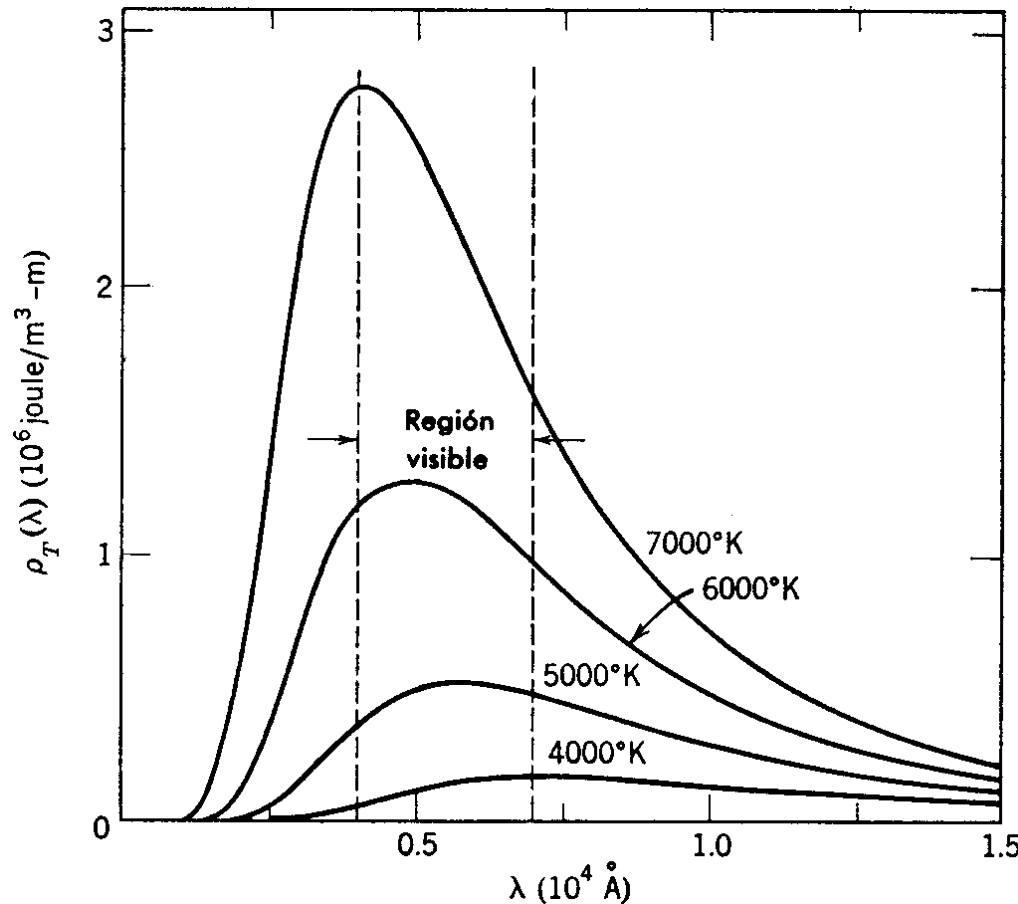


Diagrama de bandas de energía para materiales aislantes, semiconductores y metales.

Algunos materiales necesitan energías superiores a 5 eV, para que sus electrones alcancen la banda de conducción, son los aislantes. Otros con energías inferiores a 5 eV consiguen que electrones alcancen la banda de conducción, energía obtenible del “calor ambiente” se denominan semiconductores. Los metales presentan solapamiento entre las bandas de valencia y conducción en su estado natural ($R=R_0$) y son conductores desde el cero absoluto.

La materia a temperatura superior al cero absoluto radia energía.



Ley de Stefan-Boltzmann

$$\frac{dW_\lambda}{d\lambda} = \frac{2\pi hc^2}{\lambda^5} \cdot \frac{1}{e^{\left(\frac{hc}{\lambda KT}\right)} - 1}$$

$$E = \sigma \cdot T^4$$

$$\sigma = 5.67 \cdot 10^{-18} \text{ Wm}^2 / \text{° K}$$

Conforme aumenta la temperatura de la superficie de un cuerpo negro, este aumenta la cantidad y la frecuencia de la energía radiada.

El modelo de bandas de energía caracteriza los estados de conducción Eléctrica de los sólidos.

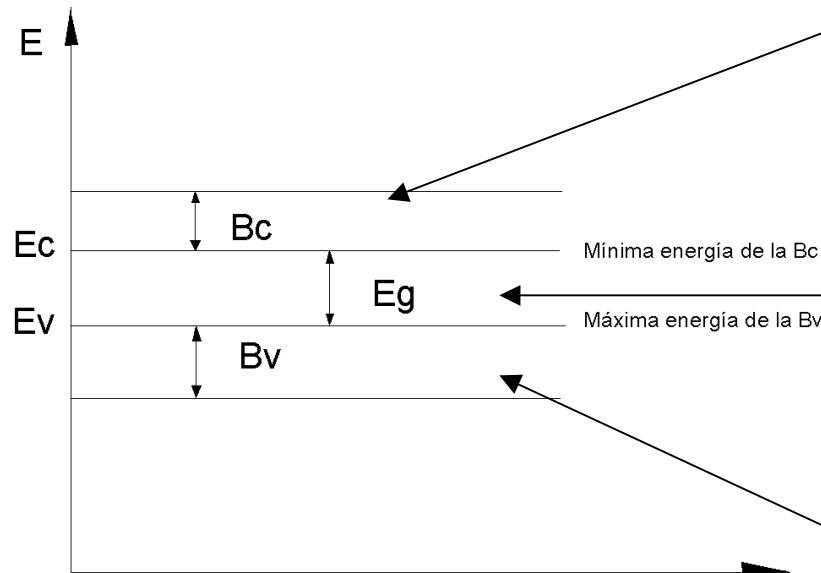


Diagrama de bandas de energía de un sólido

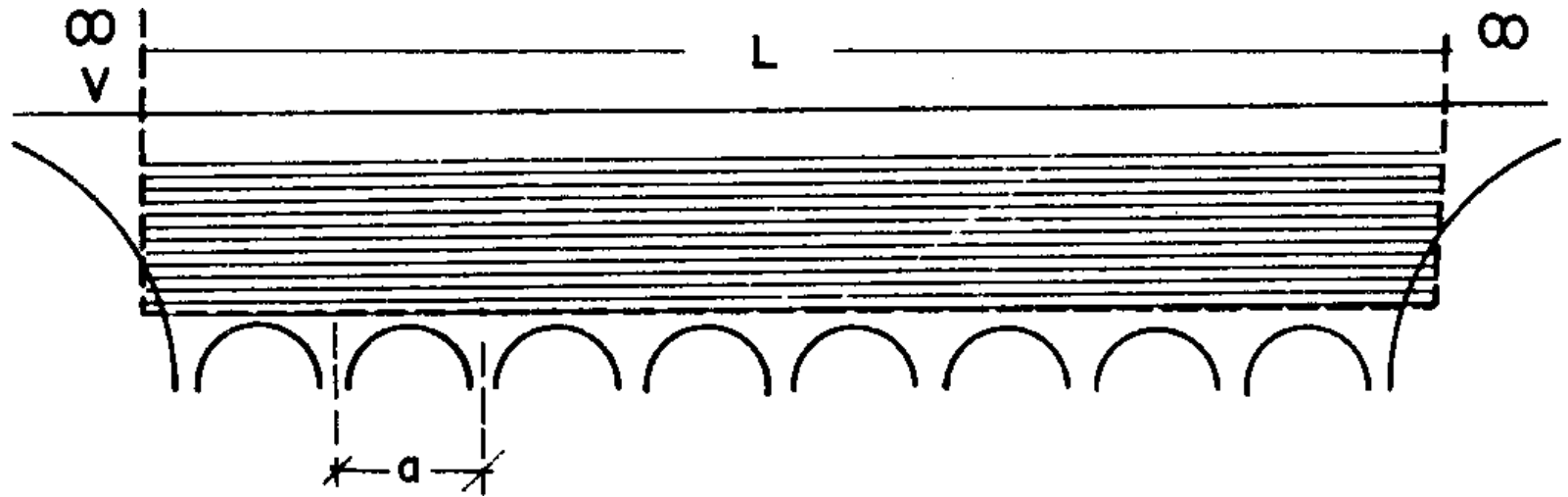
Bc: Banda de conducción = estados con libertad de movimiento en la red.

Eg: anchura de banda prohibida = energía de un electrón necesaria para alcanzar la banda de conducción.

Bv: Banda de valencia = estados sin libertad de movimiento en la red.

Los electrones con energía superior a E_c están libres de movimiento, transportan carga eléctrica por el sólido y se denominan electrones de conducción o portadores.

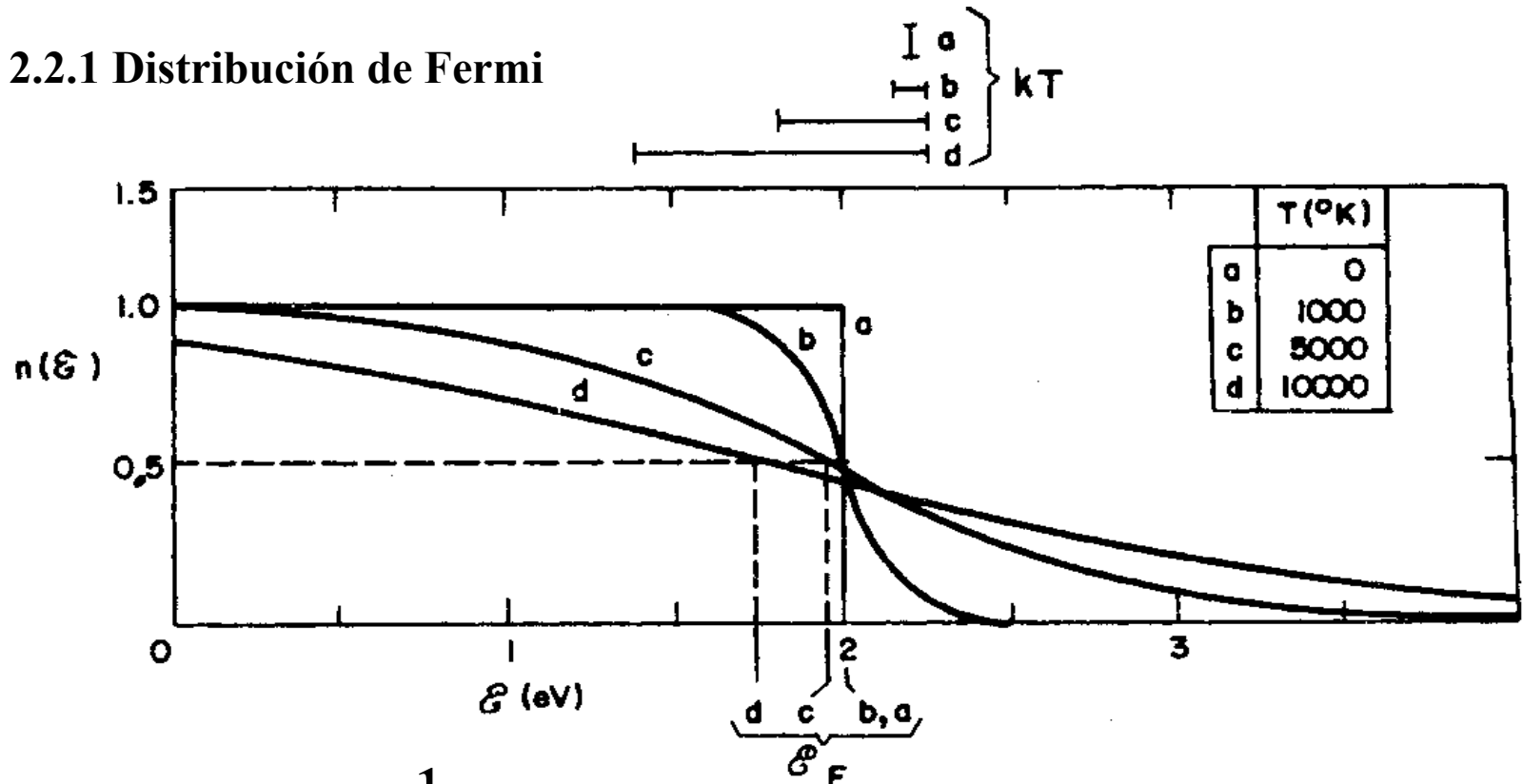
Modelo de electrones libres



Los electrones en los sólidos se integran en un conjunto de pozos de longitud total igual a las dimensiones del material y con un número finito de estados de permitidos N_c cuando tienen suficiente energía para estar fuera del pozo $E > E_c$.

2.2 Funciones de distribución.

2.2.1 Distribución de Fermi

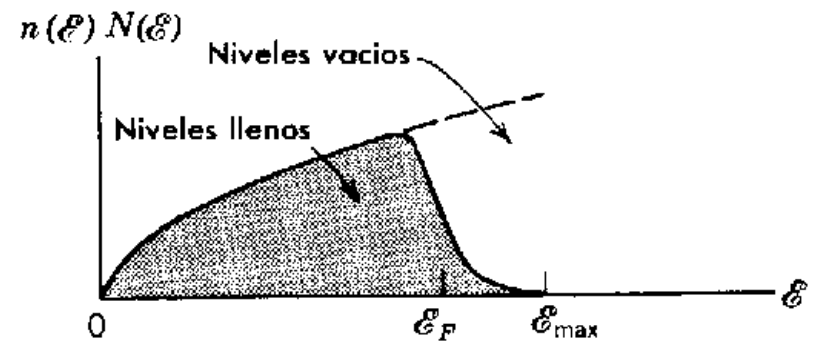
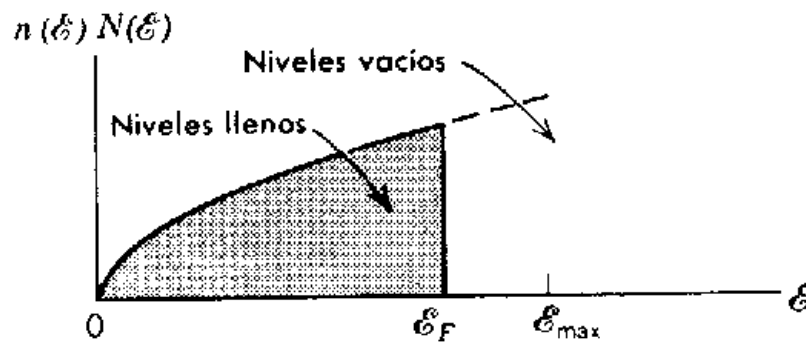
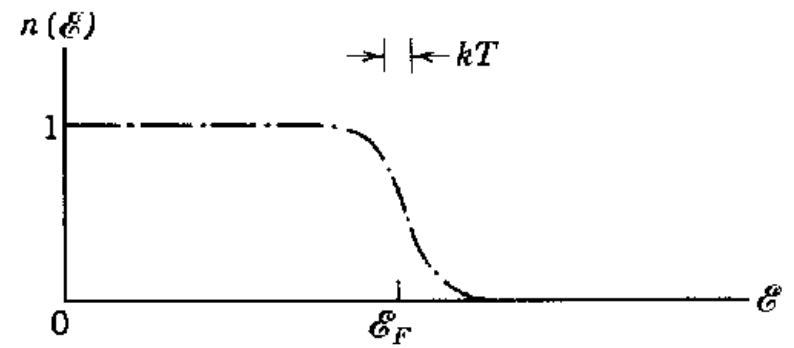
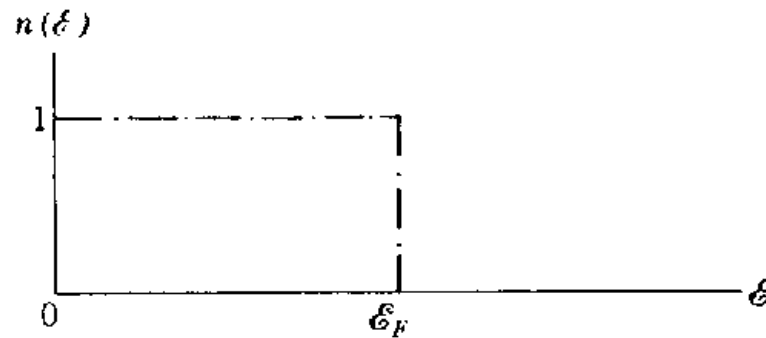
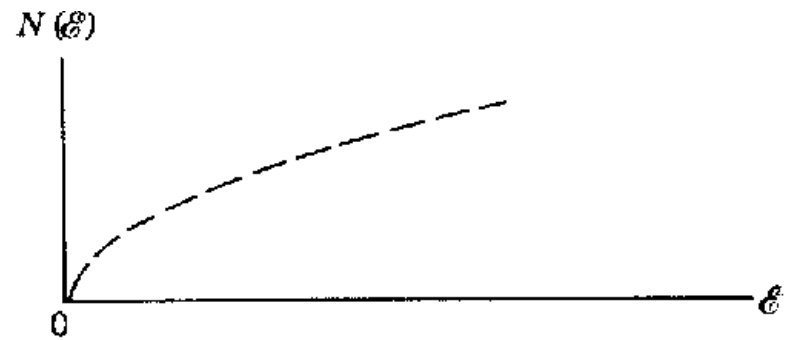
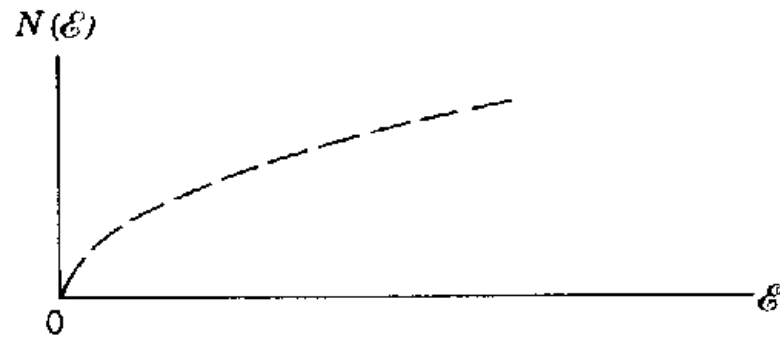


$$n(E) = \frac{1}{1 + e^{\frac{E - E_F}{KT}}}$$

$n(E)$: Distribución de Fermi, probabilidad de ocupación en función de la energía y la posición del E_F = Nivel de Fermi. $n(E_F) = 0.5$. E_F es una característica del material.

$KT = E_0 \Rightarrow$ Energía media en equilibrio térmico

Variación de la concentración con la temperatura



$T = 0$

$T > 0$

2.2.2 Calculo de la concentración de electrones de conducción

n = concentración de portadores (electrones libres)

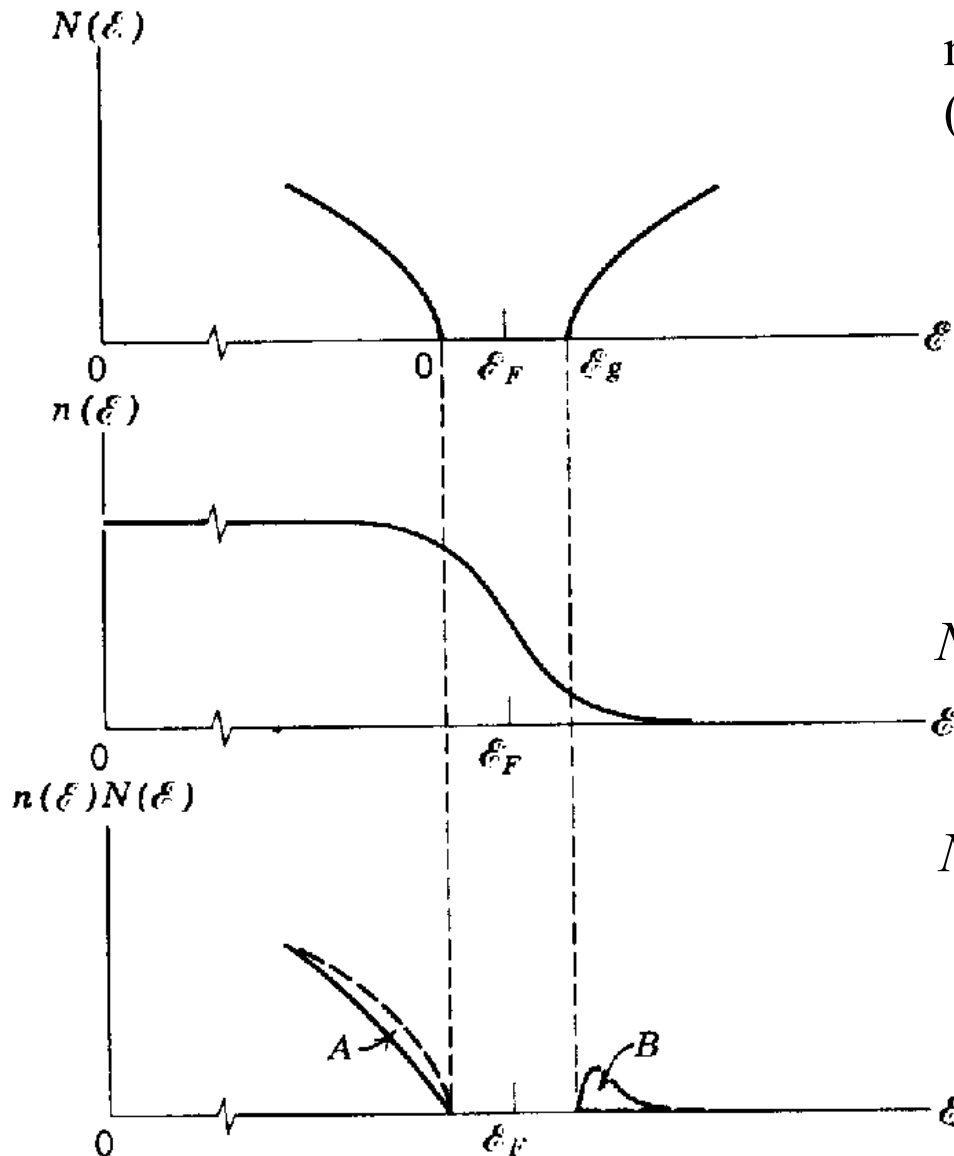
$$n = \int_0^{\infty} n(E) \cdot N(E) dE$$

$N(E)$ densidad de estados equivalentes (Estados permitidos N° estados/volumen)

$$N(E) \cdot dE = 8\pi \left(\frac{2m^*}{h^2} \right)^{3/2} \cdot E^{1/2} \cdot dE$$

$$N(E_C - \infty) = 2 \cdot \left(\frac{2\pi m^* KT}{h^2} \right)^{3/2}$$

m^* = masa efectiva del portador, característica del material.



2.2.3 Conducción eléctrica en sólidos

El comportamiento como conductor eléctrico de un sólido radica en el solapamiento de bandas permitidas de energía, lo cual depende de los detalles de la geometría de su estructura cristalina. Concretamente si la banda de valencia que debería estar completamente llena se solapa (traslapa) con otra banda que debía estar completamente vacía se obtiene dos bandas parcialmente llenas lo cual implica la **conducción eléctrica**.

Está comprobado que para que un sólido sea un aislante eléctrico es necesario que en su red cristalina haya un número par de electrones por celda unitaria, en este caso las bandas llenas estarán lejos de las vacías y no se producirá el traslape, caso del diamante $2C(8e)$, $ClNa(8e)$

Los semiconductores están en este caso pero con energía térmica ambiental, electrones alcanzan la banda de conducción.

Li > $1s^2 2s^1$: 1 e.l. Conductor

Na > $..2s^2 2p^6 3s^1$: 1 e.l. Conductor

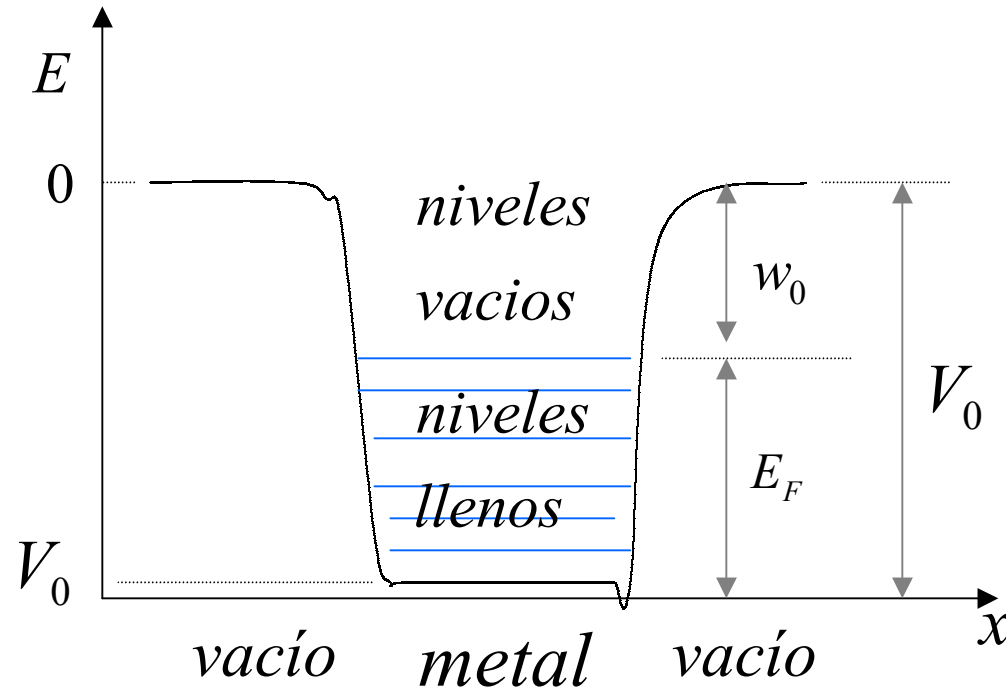
Al > $..2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$: 1 e.l. Conductor

Cu > $..3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1$: 1 e.l. Conductor

Zn > $..3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2$: 2 e.l. Conductor

S > ... $3s^2 3p^4$: 6 e.v. Aislante

2.3 Energía de extracción. Función de trabajo.



w_0 = Función de trabajo

E_F = Energía de Fermi

V_0 = **Afinidad electrónica**

$$V_0 = w_0 + E_F$$

w_0 es la energía mínima de extracción a efectos fotoeléctricos y termoiónicos, es decir los fotones y fonones han de tener energía superior a w_0 para que envíen electrones a la energía del vacío.

2.3.1 Energía de Fermi E_F

La energía de Fermi representa la mayor energía cinética de los electrones libres de un metal a 0 °K. El número total de electrones libres (electrones de conducción) coincide con el número de estados permitidos hasta la energía de Fermi.

$$E_F = \frac{h^2}{8m} \cdot \left(\frac{3N}{\pi} \right)^{\frac{2}{3}}$$

Expresión válida para $KT \ll E_F$, lo cual se cumple en metales hasta varios miles de grados.

Metal	w_0 (eV)	E_F (eV)	V_0 (eV)
Ag	4.7	5.5	10.2
Au	4.8	5.5	10.3
Ca	3.2	4.7	7.9
Cu	4.1	7.7	11.8
K	2.1	2.1	4.2
Li	2.3	4.7	7.0
Na	2.3	3.1	5.4

Cuando hay traslape de bandas (metales) la concentración de estados permitidos N coincide con la de electrones de valencia.

Los metales con un único electrón en la última órbita presentan energías mas bajas.

Resumen de formulas sobre electrones en sólidos

metales. $E_F > E_c$

$$V_0 = w_0 + E_F$$

Afinidad electrónica = función de trabajo (energía mínima de extracción) + energía de Fermi

$$E_F = \frac{h^2}{8m} \cdot \left(\frac{3N}{\pi} \right)^{\frac{2}{3}}$$

Expresión válida para $KT \ll E_F$, lo cual se cumple en **metales** hasta varios miles de grados.

no metales. $E_v < E_F < E_c$

$$n = \int_0^\infty n(E) \cdot N(E) dE$$

Concentración de electrones en una franja energética.

$$N(E_c - \infty) = N_c = 2 \cdot \left(\frac{2\pi m^* KT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}}$$

Concentración de estados permitidos en la banda de conducción

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

Distribución de Fermi: Probabilidad de ocupación de estados para una energía E .

$$n = N_c \cdot \frac{1}{1 + e^{\frac{E_g}{2KT}}}$$

Concentración de electrones (libres) en la banda de conducción en semiconductores puros: $E_F = (E_c + E_v)/2$