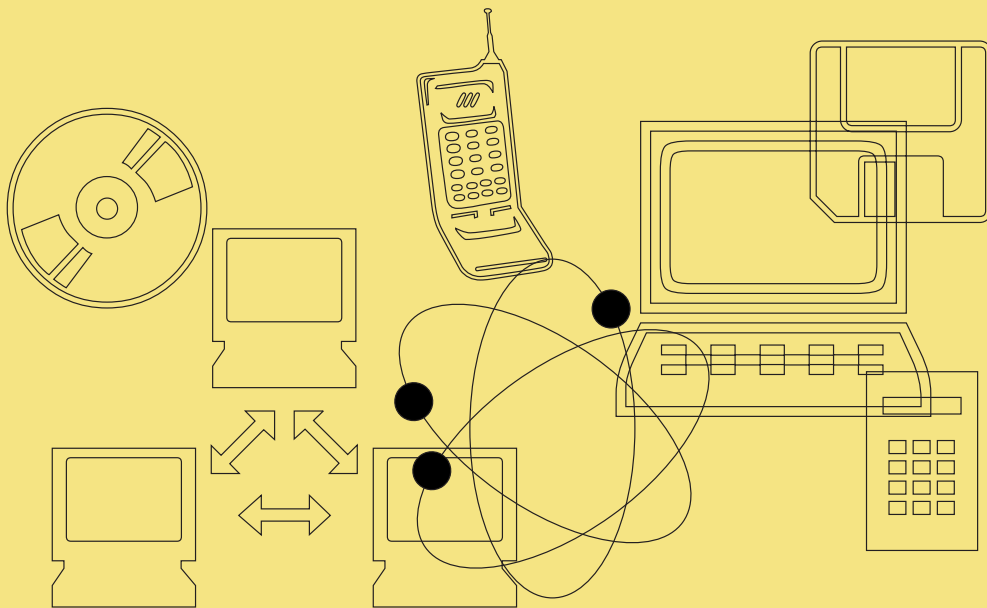


Apuntes de apoyo a la asignatura

COMPLEMENTOS de FÍSICA

E.T.S. de Ingeniería Informática

UNIVERSIDAD DE SEVILLA



Francisco L. Mesa Ledesma

Copyright ©2002 by Francisco L. Mesa Ledesma; esta información puede ser copiada, distribuida y/o modificada bajo ciertas condiciones, pero viene SIN NINGUNA GARANTÍA; ver la *Design Science License* para más detalles.

DESIGN SCIENCE LICENSE

TERMS AND CONDITIONS FOR COPYING, DISTRIBUTION AND MODIFICATION

Copyright ©1999-2001 Michael Stutz <stutz@dsL.org> Verbatim copying of this document is permitted, in any medium.

0. PREAMBLE.

Copyright law gives certain exclusive rights to the author of a work, including the rights to copy, modify and distribute the work (the reproductive, adaptative, and "distribution rights").

The idea of copyleft is to willfully revoke the exclusivity of those rights under certain terms and conditions, so that anyone can copy and distribute the work or properly attributed derivative works, while all copies remain under the same terms and conditions as the original.

The intent of this license is to be a general copyleft that can be applied to any kind of work that has protection under copyright. This license states those certain conditions under which a work published under its terms may be copied, distributed, and modified.

Whereas "design science" is a strategy for the development of artifacts as a way to reform the environment (not people) and subsequently improve the universal standard of living, this Design Science License was written and deployed as a strategy for promoting the progress of science and art through reform of the environment.

1. DEFINITIONS.

"License" shall mean this Design Science License. The License applies to any work which contains a notice placed by the work's copyright holder stating that it is published under the terms of this Design Science License.

"Work" shall mean such an aforementioned work. The License also applies to the output of the Work, only if said output constitutes a "derivative work" of the licensed Work as defined by copyright law.

"Object Form" shall mean an executable or performable form of the Work, being an embodiment of the Work in some tangible medium.

"Source Data" shall mean the origin of the Object Form, being the entire, machine-readable, preferred form of the Work for copying and for human modification (usually the language, encoding or format in which composed or recorded by the Author); plus any accompanying files, scripts or other data necessary for installation, configuration or compilation of the Work.

(Examples of "Source Data" include, but are not limited to, the following: if the Work is an image file composed and edited in PNG format, then the original PNG source file is the Source Data; if the Work is an MPEG 1.0 layer 3 digital audio recording made from a WAV format audio file recording of an analog source, then the original WAV file is the Source Data; if the Work was composed as an unformatted plaintext file, then that file is the Source Data; if the Work was composed in LaTeX, the LaTeX file(s) and any image files and/or custom macros necessary for compilation constitute the Source Data.)

"Author" shall mean the copyright holder(s) of the Work.

The individual licensees are referred to as you.

2. RIGHTS AND COPYRIGHT.

The Work is copyrighted by the Author. All rights to the Work are reserved by the Author, except as specifically described below. This License describes the terms and conditions under which the Author permits you to copy, distribute and modify copies of the Work.

In addition, you may refer to the Work, talk about it, and (as dictated by "fair use") quote from it, just as you would any copyrighted material under copyright law.

Your right to operate, perform, read or otherwise interpret and/or execute the Work is unrestricted; however, you do so at your own risk, because the Work comes WITHOUT ANY WARRANTY – see Section 7 ("NO WARRANTY") below.

3. COPYING AND DISTRIBUTION.

Permission is granted to distribute, publish or otherwise present verbatim copies of the entire Source Data of the Work, in any medium, provided that full copyright notice and disclaimer of warranty, where applicable, is conspicuously published on all copies, and a copy of this License is distributed along with the Work.

Permission is granted to distribute, publish or otherwise present copies of the Object Form of the Work, in any medium, under the terms for distribution of Source Data above and also provided that one of the following additional conditions are met:

(a) The Source Data is included in the same distribution, distributed under the terms of this License; or

(b) A written offer is included with the distribution, valid for at least three years or for as long as the distribution is in print (whichever is longer), with a publicly-accessible address (such as a URL on the Internet) where, for a charge not greater than transportation and media costs, anyone may receive a copy of the Source Data of the Work distributed according to the section above; or

(c) A third party's written offer for obtaining the Source Data at no cost, as described in paragraph (b) above, is included with the distribution. This option is valid only if you are a non-commercial party, and only if you received the Object Form of the Work along with such an offer.

You may copy and distribute the Work either gratis or for a fee, and if desired, you may offer warranty protection for the Work.

The aggregation of the Work with other works that are not based on the Work – such as but not limited to inclusion in a publication, broadcast, compilation, or other media – does not bring the other works in the scope of the License; nor does such aggregation void the terms of the License for the Work.

4. MODIFICATION.

Permission is granted to modify or sample from a copy of the Work, producing a derivative work, and to distribute the derivative work under the terms described in the section for distribution above, provided that the following terms are met:

(a) The new, derivative work is published under the terms of this License.

(b) The derivative work is given a new name, so that its name or title cannot be confused with the Work, or with a version of the Work, in any way.

(c) Appropriate authorship credit is given: for the differences between the Work and the new derivative work, authorship is attributed to you, while the material sampled or used from the Work remains attributed to the original Author; appropriate notice must be included with the new work indicating the nature and the dates of any modifications of the Work made by you.

5. NO RESTRICTIONS.

You may not impose any further restrictions on the Work or any of its derivative works beyond those restrictions described in this License.

6. ACCEPTANCE.

Copying, distributing or modifying the Work (including but not limited to sampling from the Work in a new work) indicates acceptance of these terms. If you do not follow the terms of this License, any rights granted to you by the License are null and void. The copying, distribution or modification of the Work outside of the terms described in this License is expressly prohibited by law.

If for any reason, conditions are imposed on you that forbid you to fulfill the conditions of this License, you may not copy, distribute or modify the Work at all. If any part of this License is found to be in conflict with the law, that part shall be interpreted in its broadest meaning consistent with the law, and no other parts of the License shall be affected.

7. NO WARRANTY.

THE WORK IS PROVIDED AS IS, AND COMES WITH ABSOLUTELY NO WARRANTY, EXPRESS OR IMPLIED, TO THE EXTENT PERMITTED BY APPLICABLE LAW, INCLUDING BUT NOT LIMITED TO THE IMPLIED WARRANTIES OF MERCHANTABILITY OR FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE.

8. DISCLAIMER OF LIABILITY.

IN NO EVENT SHALL THE AUTHOR OR CONTRIBUTORS BE LIABLE FOR ANY DIRECT, INDIRECT, INCIDENTAL, SPECIAL, EXEMPLARY, OR CONSEQUENTIAL DAMAGES (INCLUDING, BUT NOT LIMITED TO, PROCUREMENT OF SUBSTITUTE GOODS OR SERVICES; LOSS OF USE, DATA, OR PROFITS; OR BUSINESS INTERRUPTION) HOWEVER CAUSED AND ON ANY THEORY OF LIABILITY, WHETHER IN CONTRACT, STRICT LIABILITY, OR TORT (INCLUDING NEGLIGENCE OR OTHERWISE) ARISING IN ANY WAY OUT OF THE USE OF THIS WORK, EVEN IF ADVISED OF THE POSSIBILITY OF SUCH DAMAGE.

END OF TERMS AND CONDITIONS

Prefacio

La presente colección de notas sobre Física Cuántica y Física del Estado Sólido pretende ser una ayuda al estudiante en la asignatura cuatrimestral *Complementos de Física* de la E.T.S. de Ingeniería Informática de la Universidad de Sevilla. Aunque estas notas han sido inspiradas por diversas fuentes (permítaseme destacar y agradecer la importante contribución de los profesores de la ETS de Ingeniería Informática del Departamento de Física Aplicada 1 de la Universidad de Sevilla), cualquier defecto o error sólo es atribuible al autor de estos apuntes. Es importante resaltar que estas notas no pueden ni deben sustituir a otros textos más elaborados sobre la materia.

El objetivo principal de la materia presentada es dotar al alumno de algunos de los fundamentos físicos elementales en los que se basa el funcionamiento de los dispositivos y sistemas usados en Informática. Gran parte de la tecnología actual de los computadores se basa en la Electrónica. Dado que la Electrónica consiste básicamente en el control del flujo de los electrones en materiales conductores y semiconductores, es evidente la necesidad de estudiar el comportamiento de dichos electrones en metales y semiconductores. Este estudio se llevará a cabo mediante una serie de temas introductorios de Física Cuántica y Atómica donde se presentan las propiedades fundamentales de las partículas cuánticas. Posteriormente se analiza el comportamiento de los electrones en metales y semiconductores, para lo cual debemos considerar sus características cuánticas y estadísticas. Finalmente, estudiaremos el comportamiento de la unión p-n puesto que es la base de multitud de dispositivos electrónicos y optoelectrónicos usados en la tecnología de los computadores.

FRANCISCO L. MESA LEDESMA
Sevilla, febrero de 2001

Índice general

1. Fundamentos de Física Cuántica	1
1.1. Introducción	1
1.2. Cuantización de la radiación	3
1.2.1. Espectros ópticos	3
1.2.2. Efecto fotoeléctrico	5
1.3. Dualidad de la radiación	10
1.4. Modelo atómico de Bohr	11
1.5. Dualidad de la materia	15
1.5.1. Hipótesis de De Broglie	15
1.5.2. Verificación experimental	17
1.5.3. Naturaleza de la onda	19
1.6. Principio de Heisenberg	21
1.6.1. Principio de incertidumbre posición / momento	21
1.6.2. Principio de incertidumbre energía-tiempo . . .	24
1.7. Problemas propuestos	26
2. Ecuación de Schrödinger. Aplicaciones	29
2.1. Ecuación de Schrödinger	29
2.2. Partícula ligada. Cuantización	32
2.2.1. Partícula Libre	32
2.2.2. Pozo potencial infinito monodimensional . . .	33
2.2.3. Pozo de potencial tridimensional	36
2.3. Efecto túnel	39
2.4. Átomos hidrogenoides	40
2.4.1. Números cuánticos	40
2.4.2. Spin del electrón	44

2.5. Tabla periódica	45
2.6. Problemas propuestos	47
3. Materia Condensada	51
3.1. Estados de Agregación de la Materia	51
3.2. Gas	53
3.3. Monocristal	56
3.4. Estructuras reticulares	57
3.4.1. Redes de Bravais	57
3.4.2. Parámetros de la estructura reticular	58
3.5. Observación de las estructuras cristalinas	60
3.6. Problemas propuestos	61
4. Electrones libres en metales	63
4.1. Fenomenología	63
4.2. Modelo clásico del electrón libre	65
4.2.1. Hipótesis básicas	66
4.2.2. Dependencia con la temperatura	68
4.2.3. Fallos del modelo de Drude	69
4.3. Modelo cuántico del electrón libre	69
4.3.1. Función densidad de estados	70
4.3.2. Distribución de Fermi-Dirac	70
4.3.3. Conducción eléctrica	73
4.3.4. Fallos del modelo de Sommerfeld	74
4.4. Problemas propuestos	74
5. Electrones en una red periódica	77
5.1 Modelo cuántico del electrón ligado	77
5.1.1. Aproximación de fuerte enlace	79
5.1.2. Bandas de energía	82
5.2. Aislantes, Semiconductores y Conductores	84
5.3. Masa efectiva	86
5.4. Huecos	90
5.5. Problemas propuestos	92
6. Bandas de Energía en Semiconductores	95

6.1. Introducción	95
6.2. Generación y recombinación de electrones y huecos . .	96
6.3. Semiconductores Intrínsecos	98
6.3.1. Descripción cualitativa	98
6.3.2. Probabilidad de ocupación de electrones y huecos	100
6.3.3. Posición del nivel de Fermi para semiconductores intrínsecos	100
6.3.4. Función densidad de estados para electrones y huecos	100
6.3.5. Distribución energética de huecos y electrones .	103
6.4. Semiconductores Extrínsecos	105
6.4.1. Semiconductor tipo n	105
6.4.2. Semiconductor tipo p	106
6.4.3. Distribución energética de huecos y electrones .	107
6.5. Problemas propuestos	108
7. Portadores de carga en Semiconductores	111
7.1. Introducción	111
7.2. Concentración de electrones y huecos	111
7.2.1. Ley de acción masas	114
7.3. Compensación y Neutralidad de la carga espacial	116
7.3.1. Cálculo aproximado de n y p	117
7.3.2. Cálculo de E_F para semiconductores intrínsecos y extrínsecos	118
7.4. Conductividad eléctrica en semiconductores	120
7.5. Corrientes de Arrastre y Difusión	122
7.5.1. Proceso de difusión	122
7.5.2. Corriente de difusión	123
7.5.3. Corriente total	124
7.5.4. Campo eléctrico interno	125
7.6. Velocidad de generación y recombinación	128
7.7. Ecuación de continuidad	130
7.7.1. Ecuación de difusión	132
7.7.2. Inyección constante de portadores	133

7.8. Problemas propuestos	134
8. Unión p-n	137
8.1. Introducción	137
8.2. Unión p-n en equilibrio	138
8.2.1. Potencial de Contacto	138
8.2.2. Región de carga espacial	141
8.3. Unión p-n polarizada	143
8.3.1. Descripción cualitativa de las corrientes en la unión	143
8.3.2. Ecuación del diodo. Cálculo simplificado	147
8.4. Láser Semiconductor	151
8.4.1. Propiedades eléctricas	152
8.4.2. Propiedades ópticas	154
8.4.3. Estructura del láser semiconductor	158
8.5. Aplicaciones del Láser	161
8.5.1. Aplicaciones del Láser de Inyección	162
8.6. Problemas propuestos	165
A. Constantes fundamentales	167
B. Energía y longitud de onda de una partícula relativista	169
C. Promedios estadísticos	171
C.1. Sistemas Discretos	171
C.2. Sistemas Continuos	172
D. Propiedades de algunos materiales semiconductores	173
E. Invarianza del nivel de Fermi en equilibrio	175

Capítulo 1

Fundamentos de Física Cuántica

1.1. Introducción

De una forma muy genérica denominaremos **Física Cuántica** a la Física que se desarrolló a principios del siglo XX para explicar el comportamiento de los fenómenos que ocurren a muy pequeña escala (el ámbito microscópico donde los órdenes de magnitud involucrados son: distancia $\sim 1 \text{ \AA}$, masa $\sim 10^{-27} \text{ kg}$, energía $\sim 10^{-19} \text{ J}$). Esta nueva Física complementa a la denominada **Física Clásica** que se desarrolló para ser aplicada en el ámbito macroscópico (fenómenos que involucran órdenes de magnitud del orden de 1 m, 1 kg, 1 J) y que podemos identificar, por ejemplo, con las leyes de Newton, las ecuaciones de Maxwell, etc. Antes de introducir los fundamentos de la Física Cuántica, es conveniente resaltar que la Física Cuántica trajo consigo, además de nuevos resultados, cambios conceptuales muy importantes que afectan a la forma en la que habitualmente entendemos el mundo que nos rodea. No obstante, cabe señalar que estos cambios conceptuales afectan drásticamente a nuestra visión del mundo microscópico pero no tanto a la del mundo macroscópico (aunque obviamente muchos fenómenos macroscópicos sólo pueden entenderse con base en los principios de la Física Cuántica).

La Física siempre afronta el estudio de los fenómenos mediante el estudio de *modelos*, esto es, representaciones parciales de la realidad. Es entonces importante aclarar que lo que se estudia no es directamente la realidad sino el “modelo” que nosotros hacemos de ella. Usualmente, el modelo es una simplificación de la realidad que recoge, no obstante, las características esenciales del aspecto físico en el que estamos interesados. Así, si queremos estudiar el efecto de la gravedad sobre los cuerpos, un posible modelo elemental sería el suponer que los cuerpos son puntuales (su masa está concentrada en un punto), que la gravedad es constante y que se desprecia el efecto del rozamiento

con el aire. Este modelo simplificado explicaría satisfactoriamente, por ejemplo, el tiempo que tarda en caer una piedra desde cierta altura pero no describiría muy adecuadamente la caída de una hoja de papel. En consecuencia, el estudio de este último fenómeno requeriría el uso de otro modelo más complejo. En este sentido, es interesante constatar que la mayoría de los modelos que intentan describir el mundo *macroscópico* se basan parcialmente en el “sentido común” (esto es, en la manera en la que nuestros sentidos perciben la realidad). De esta forma, se suponen características generales como

- continuidad de la materia y la energía (es decir, la materia y la energía pueden tomar cualquier valor e intercambiarse en cualquier cantidad);
- diferenciación objetiva entre fenómenos ondulatorios y corpusculares;
- posibilidad de minimizar completamente el efecto del observador sobre el fenómeno observado, etc.

Cuando se afronta el estudio de los fenómenos *microscópicos* (por ejemplo, el estudio de los átomos), una primera posibilidad sería la de partir de los modelos y categorías que se usaron con éxito en el ámbito macroscópico y extrapolarlos al nuevo ámbito de muy pequeñas escalas. En este sentido podríamos considerar el átomo como un sistema de cargas puntuales (algunas de ellas en movimiento) regidas por las leyes de la Electrodinámica. No obstante, al iniciar el estudio del ámbito microscópico se observó que la extrapolación directa de los modelos macroscópicos llevaba irremediablemente a resultados muy dispares con la realidad. Hubo, por tanto, que hacer un gran esfuerzo no sólo para desarrollar nuevas leyes físicas sino también para olvidar muchos de los conceptos y categorías válidas en el ámbito macroscópico y buscar otros nuevos que fuesen aplicables al ámbito microscópico. Gran parte de la dificultad de la nueva Física Cuántica recae en el hecho de que las leyes que rigen el comportamiento del ámbito microscópico son tremendamente antiintuitivas.

Este primer tema mostrará, siguiendo un cierto orden cronológico, los fundamentos de la Física Cuántica; en concreto nos centraremos en la presentación de las leyes básicas y discutiremos algunas de sus consecuencias más inmediatas. Un buen entendimiento de estas leyes y sus consecuencias será fundamental para la posterior comprensión del comportamiento de los electrones en los materiales conductores y semiconductores. En consecuencia, la comprensión física de los fenómenos cuánticos nos proporcionará la base necesaria para entender el funcionamiento de los múltiples dispositivos electrónicos y optoelectrónicos que son la base de la actual tecnología de los computadores y previsiblemente nos dotará de la base científica imprescindible para entender futuros desarrollos de la tecnología informática.

1.2. Cuantización de la radiación

El inicio de la Física Cuántica puede situarse en el final del siglo XIX, momento en el que se estaba estudiando la interacción de la radiación con la materia. En concreto se estaba investigando la naturaleza del espectro de radiación emitida por los distintos cuerpos.

1.2.1. Espectros ópticos

Es un hecho bien conocido que *cualquier cuerpo caliente emite radiación electromagnética*¹. La distribución con respecto a la frecuencia, ν , de esta radiación se conoce como **espectro**. Las observaciones experimentales permitieron establecer la existencia de varios tipos de espectros: espectros discretos (emitidos por gases de átomos aislados), espectros de bandas (emitidos por gases moleculares) y espectros continuos (emitidos por cuerpos sólidos). A continuación esbozaremos algunas de las características de los espectros discretos y continuos.

■ Espectros Discretos

Empíricamente se comprobó que la radiación emitida (y absorbida) por sustancias formadas por elementos químicos aislados (en forma de gases) tenía un carácter *discreto*; esto es, estas sustancias solo emiten (y absorben) radiación para un conjunto discreto de frecuencias. Este hecho experimental era muy sorprendente e imposible de explicar en el marco de la Física Clásica. Para el caso del hidrógeno (H) se comprobó que su espectro está formado por una familia de líneas espectrales cuya longitud de onda ($\lambda = c/\nu$, $c \approx 3 \times 10^8$ m/s) sigue la siguiente ley empírica:

$$\frac{1}{\lambda} = R_{\infty} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad m < n (\in \mathbb{N}), \quad (1.1)$$

que se conoce como **formula de Rydberg-Ritz** y donde $R_{\infty} = 1,0967 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$ es la denominada constante de Rydberg. Para cada valor de m y variando n se obtienen distintas familias de líneas espectrales conocidas como las series del hidrógeno. Una expresión particular para el espectro visible del H, conocido como serie de Balmer, fue obtenida en 1885 por Balmer, siendo, no obstante un caso particular de la ley general (1.1) cuando $m = 2$. Es importante resaltar que la fórmula de Rydberg-Ritz es una ley completamente *empírica* que fue propuesta en ese momento sin

¹La explicación clásica de este hecho se basa en la suposición de que la temperatura es una medida de la energía cinética media de las partículas que componen la materia. Dado que la materia está compuesta de átomos y éstos a su vez están formados por partículas cargadas, un cuerpo caliente puede considerarse como un conjunto de osciladores cargados (se supone que, debido a su menor masa, la carga negativa oscila en torno al núcleo de carga positiva). Estos osciladores de carga emiten entonces radiación electromagnética al igual que lo hacen los dipolos eléctricos oscilantes.

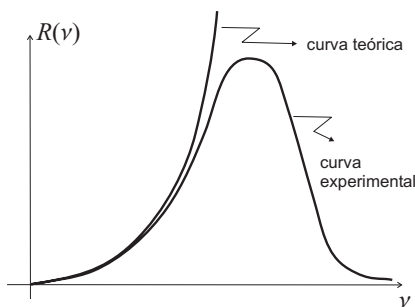
ninguna explicación física que justificase el ajuste sorprendente de dicha expresión con los resultados experimentales.

■ Espectros Continuos

Estos espectros son emitidos por los cuerpos sólidos. Dado que la emisión de los sólidos dependía en parte de su composición, en el estudio de estos espectros se buscaba un cuerpo cuya emisión fuese independiente de la forma y composición particular del emisor. En este sentido, se define como **cuerpo negro** a un emisor cuyo espectro no dependa de su forma y composición. Un estudio siguiendo las leyes de la Física Clásica, que queda fuera del alcance de este tema, permite establecer que la expresión teórica para la radiancia espectral, $R(\nu)$ (intensidad de la radiación emitida con frecuencias comprendidas entre ν y $\nu + d\nu$) viene dada por

$$R(\nu) \propto \nu^2 T, \quad (1.2)$$

donde T es la temperatura absoluta (en grados Kelvin) del cuerpo negro.



Cuando la expresión teórica (1.2) se comparaba con los datos experimentales (ver figura adjunta), se observaba una buena concordancia para bajas frecuencias pero una discrepancia total para frecuencias altas. Esta discrepancia es tan importante (para frecuencias muy altas $R(\nu)$ tiende a cero según los datos experimentales mientras que el resultado teórico tiende a infinito) que se conoce como **catástrofe ultravioleta** puesto que las diferencias empiezan a ser muy importantes para frecuencias de radiación ultravioleta. La catástrofe ultravioleta es una clarísima constatación de que había algo fundamentalmente erróneo en la aplicación de las leyes conocidas hasta ese momento al estudio del espectro de radiación del cuerpo negro.

Afortunadamente, en 1900 Planck incorporó un nuevo enfoque a este problema que sorprendentemente conducía a una teoría que se ajustaba perfectamente a los resultados experimentales. La propuesta de Planck fue que

Hipótesis de Planck

los osciladores atómicos realizan intercambios de energía con la radiación de modo que la acción, S (energía $\times$ tiempo), varía únicamente en múltiplos de $h = 6,62 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$.

La cantidad de intercambio de acción mínima, h , se conoce como **constante de Planck** y tiene por valor

Constante de Planck

$$h = 6,62 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s} = 4,135 \times 10^{-15} \text{ eV}\cdot\text{s} \quad (1.3)$$

($1 \text{ eV} = 1,6 \times 10^{-19} \text{ J}$, $e = 1,6 \times 10^{-19} \text{ C}$ es el módulo de la carga del electrón en el S.I.).

La anterior hipótesis implicaba que en el periodo T de oscilación de los osciladores atómicos, el intercambio de acción, ΔS , debía ser

$$\Delta S = nh = \Delta E \cdot T \quad n = 1, 2, \dots, \quad (1.4)$$

siendo ΔE la energía puesta en juego en el intercambio energético. A partir de (1.4) encontramos entonces que

$$\Delta E = nh \frac{1}{T} = nh\nu. \quad (1.5)$$

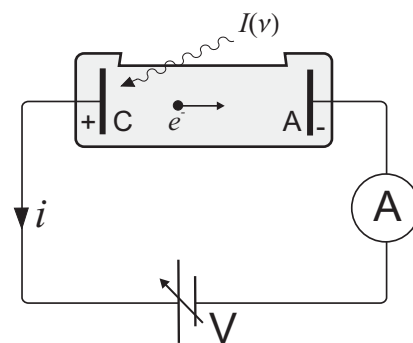
La anterior expresión, fruto de la hipótesis de Planck, indica que el intercambio energético mínimo es $h\nu$ y que cualquier otro intercambio energético siempre se produce en múltiplos de esta cantidad. Este resultado tiene dos implicaciones muy destacadas:

1. La interacción energética entre dos sistemas no puede hacerse menor que $h\nu$. Este resultado es abiertamente opuesto a la hipótesis clásica de que la interacción entre dos sistemas podía hacerse tan pequeña como se quisiera.
2. La energía puesta en juego en las interacciones está **cuantizada**. De nuevo, este sorprendente resultado contradice la hipótesis acerca del carácter continuo de la energía.

Es interesante finalmente notar que las consecuencias anteriores apenas tienen efecto en las interacciones entre sistemas macroscópicos. Ello es debido a que los valores de energía puestos en juego en los intercambios energéticos son generalmente mucho más altos que $h\nu$, por lo que la existencia de una cantidad mínima de energía de intercambio apenas difiere de la suposición de que ésta sea infinitesimal. Este hecho provoca que la cuantización energética sea prácticamente inapreciable haciendo, por tanto, aceptable el hecho de que la energía se considere continua a efectos prácticos.

1.2.2. Efecto fotoeléctrico

Otro efecto muy destacado fruto de la interacción entre la luz y la materia es el efecto fotoeléctrico. Este efecto se produce cuando al incidir luz sobre ciertos metales, éstos emiten electrones (que denominaremos *fotodectrones*). Un dispositivo experimental apropiado para estudiar el efecto fotoeléctrico se muestra en la figura adjunta y consiste en un tubo de vacío con dos placas metálicas en su interior. Al incidir luz de intensidad $I(\nu)$ sobre el metal del que está compuesto la placa C, éste emite electrones que, si son acelerados por un potencial (V) impuesto entre las placas situadas en el interior del tubo de vacío, son arrastrados hasta la placa A. Este flujo de electrones da lugar a una corriente eléctrica, i , que es detectada por el amperímetro puesto a tal efecto.



Una de las principales ventajas del anterior montaje experimental es que nos permite determinar la energía cinética, E_c , de los fotoelectrones. Notemos que si $V < 0$, el campo impuesto entre las placas acelera los fotoelectrones hacia la placa A, pero si $V > 0$, el campo eléctrico frenará los fotoelectrones dificultando así su camino hacia el ánodo. El efecto de frenado será total cuando la energía que proporciona el campo a los fotoelectrones, eV , sea igual a la energía cinética máxima, $E_{c,\max}$, de los fotoelectrones, esto es, cuando

$$eV_R = E_{c,\max} , \quad (1.6)$$

siendo V_R el valor de potencial eléctrico conocido como *potencial de frenado*.

El estudio *experimental* del efecto fotoeléctrico pone de manifiesto las siguientes características:

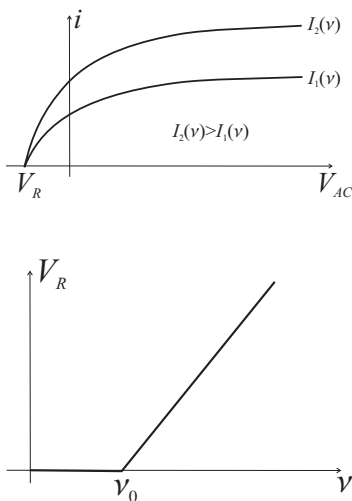
- La emisión fotoeléctrica es *instantánea*.
- Existe cierta frecuencia para la radiación incidente, conocida como *frecuencia umbral*, ν_0 , por debajo de la cual no existe emisión fotoeléctrica, independientemente de la intensidad de dicha radiación; es decir, $i = 0 \quad \forall I(\nu)$ si $\nu < \nu_0$
- Al aumentar la intensidad de la radiación, aumenta el número de fotoelectrones emitidos y, en consecuencia, la intensidad de la corriente es mayor.
- Para una frecuencia fija, la energía cinética de los fotoelectrones no depende de la intensidad de la radiación incidente.
- La energía cinética máxima de los fotoelectrones (cuya magnitud es proporcional al potencial de frenado V_R) muestra una dependencia lineal de la frecuencia.

La mayoría de los anteriores resultados experimentales resultan realmente sorprendentes y contradictorias cuando se intentan interpretar a partir de los postulados de la Física Clásica. En este marco, la luz es

- una onda electromagnética cuya energía está repartida de forma *continua* en el frente de ondas;
- su intensidad promedio, I , viene dada por la expresión

$$I = \frac{1}{2} \epsilon_0 c \mathcal{E}_0^2 , \quad (1.7)$$

donde ϵ_0 es la permitividad del vacío y $\mathcal{E}_0$ es la amplitud del campo eléctrico de la onda luminosa. Es interesante notar que, según (1.7), la intensidad (y por tanto la energía) de la onda electromagnética no depende de la frecuencia sino simplemente de la amplitud del campo eléctrico.



En el metal hay que considerar que los electrones susceptibles de ser emitidos están “ligados” al metal con una cierta energía umbral Φ_e , denominada también *función trabajo*. Para que un electrón sea desprendido del metal, éste debe “adquirir” una energía suficiente para romper su “ligadura” con el metal, manifestándose el posible exceso de energía en forma de energía cinética del electrón emitido. Desde este punto de vista, la luz incidente en el cátodo será la encargada de proporcionar (durante cierto intervalo de tiempo) la energía suficiente a cada electrón para que éste puede salir del metal. No obstante, el cálculo teórico del tiempo requerido para que se inicie la emisión proporciona un valor muchísimo mayor que el observado experimentalmente (recuérdese que el efecto fotoeléctrico es prácticamente instantáneo). Por otra parte, si mantenemos fija la frecuencia y aumentamos la intensidad de la radiación luminosa, esperamos de acuerdo a la expresión (1.7) que llegue más energía al metal y que, por tanto, la energía cinética de los fotoelectrones aumente. Hemos visto que la experiencia contradice esta suposición, mostrando que dicha energía cinética máxima no depende de la intensidad de la radiación incidente sino sorprendentemente de su frecuencia.

EJEMPLO 1.1 Calcule el tiempo que habría que esperar para que se produjese el efecto fotoeléctrico si una radiación luminosa emitida por una fuente de luz de $P = 100 \text{ W}$ y rendimiento luminoso $\rho = 8\%$ incide sobre un metal que está situado a 1 m de distancia y cuya función trabajo es $\Phi_e = 4 \text{ eV}$. Suponga que el radio aproximado de un átomo es $r_{\text{átomo}} = 1 \text{ \AA}$.

La intensidad luminosa, I , emitida por la fuente de luz que llega al metal es

$$I = \rho \frac{P}{4\pi R^2} = 0,08 \frac{100}{4\pi 1^2} = \frac{2}{\pi} \text{ W/m}^2,$$

por lo que la potencia captada por cada átomo vendrá dada por

$$P_{\text{átomo}} = I \cdot \pi r_{\text{átomo}}^2 = \frac{2}{\pi} \pi 10^{-20} = 2 \times 10^{-20} \text{ W}.$$

Finalmente, el tiempo de espera, Δt , para que se acumule la energía umbral suficiente, Φ_e , es

$$\Delta t = \frac{\Phi_e}{P_{\text{átomo}}} = \frac{4 \cdot 1,6 \times 10^{-19}}{2 \times 10^{-20}} \approx 32 \text{ s}.$$

Nótese que el cálculo del tiempo de espera calculado según el modelo ondulatorio de la radiación luminosa nos da un valor ($\Delta t \approx 32 \text{ s}$) muchísimo más alto que el observado experimentalmente (emisión espontánea).

En 1905, A. Einstein proporcionó una explicación satisfactoria al efecto fotoeléctrico aportando además una concepción revolucionaria de la energía radiante. Básicamente Einstein, partiendo la hipótesis de Planck acerca de la cuantización del intercambio energético, dio un

paso más extendiendo la nueva idea de cuantización a la propia energía radiante (y no sólo a su posible intercambio). En concreto, Einstein explicó el efecto fotoeléctrico a partir de las dos siguientes hipótesis:

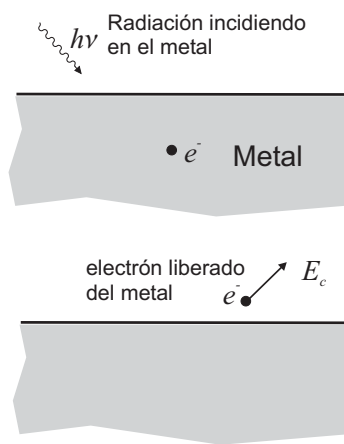
1. La energía de la onda electromagnética de frecuencia ν no está distribuida continuamente en el frente de onda sino que está localizada en pequeños paquetes (entes como partículas) llamados **fotones** cuya energía es

Energía del fotón

$$E = h\nu = \hbar\omega . \quad (1.8)$$

$$(\hbar = h/2\pi, \omega = 2\pi\nu).$$

2. El efecto fotoeléctrico es fruto de procesos individuales de intercambio instantáneo de la energía del fotón con la del electrón.



El primer punto indica que Einstein concibe la onda electromagnética como un conjunto de paquetes discretos de energía $h\nu$, esto es, la propia energía de la onda estaría cuantizada. El efecto fotoeléctrico podría entonces verse como un conjunto de “choques elásticos” individuales entre los fotones de la radiación incidente y los electrones ligados del interior del metal. Supuesta que la energía se conserva en este “choque”, el fotón cede toda su energía $h\nu$ al electrón, adquiriendo éste por tanto una energía que sería empleada parcialmente para vencer la función trabajo, Φ_e , apareciendo la restante en forma de energía cinética, E_c , esto es,

$$h\nu = E_c + \Phi_e . \quad (1.9)$$

Dado que la expresión (1.6) relaciona la energía cinética de los fotoelectrones con el potencial de frenado, V_R , tenemos que

$$\left. \begin{array}{l} E_c = h\nu - \Phi_e \\ E_c = eV_R \end{array} \right\} \Rightarrow eV_R = h\nu - \Phi_e ,$$

lo que nos permite escribir finalmente

Ecuación de Einstein para el efecto fotoeléctrico

$$V_R = \frac{h}{e} \nu - \frac{\Phi_e}{e} . \quad (1.10)$$

El sencillo desarrollo anterior muestra que existe una relación lineal entre V_R y ν , siendo la pendiente de esta recta h/e . También explica la existencia de una frecuencia umbral, $\nu_0 = \Phi_e/h$, por debajo de la cual no puede existir efecto fotoeléctrico (puesto que la energía cinética asociada al electrón sería negativa). La expresión teórica (1.10) coincide satisfactoriamente con los resultados experimentales, confirmando la sorprendente hipótesis de la naturaleza fotónica de la radiación y proporcionando una prueba adicional de que la constante h introducida por Planck es una constante fundamental de la Naturaleza y no, simplemente, una constante arbitraria de ajuste.

Dado que la emisión de fotoelectrones crece al aumentar la intensidad de la radiación, I , esta magnitud debe estar relacionada con el

número de choques y, en consecuencia, puede relacionarse con la densidad de fotones, N_f (número de fotones por unidad de tiempo y área), de la radiación. Podemos escribir, por tanto, que

$$I = N_f \hbar \omega . \quad (1.11)$$

Por otra parte, dado que los fotones transportan una energía E , también deben transportar un momento lineal p . En su teoría de la Relatividad Especial, Einstein demostró que el momento lineal de los fotones estaba relacionado con su energía mediante la siguiente relación:

$$p = \frac{E}{c} , \quad (1.12)$$

siendo c la velocidad de la luz. Como la energía del fotón es $E = h\nu$, encontramos que

$$p = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} , \quad (1.13)$$

momento del fotón

donde se ha tenido en cuenta que la frecuencia de la onda, ν , está relacionada con su longitud de onda, λ , mediante $\lambda\nu = c$.

EJEMPLO 1.2 Una radiación luminosa de $\lambda = 2000\text{\AA}$ e intensidad $I = 3\text{ mW/m}^2$ incide sobre un metal de Cu cuya función trabajo es $\Phi_e = 1\text{ eV}$. Calcule (a) el número de fotones por unidad de tiempo y área que llegan al metal; (b) el momento de cada uno de los fotones; y (c) la energía cinética de los fotoelectrones emitidos.

- (a) Para calcular el número de fotones por unidad de tiempo y área debemos aplicar la expresión (1.11), para lo cual debemos obtener primero la frecuencia, ν , de la radiación:

$$\nu = \frac{c}{\lambda} = \frac{3 \times 10^8}{2 \times 10^{-7}} = 1,5 \times 10^{15} \text{ Hz} ,$$

por lo que la energía, E , de cada fotón será

$$E = h\nu = 6,63 \times 10^{-34} \cdot 1,5 \times 10^{15} \approx 9,95 \times 10^{-19} \text{ J} = 6,21 \text{ eV} .$$

La aplicación de (1.11) nos dice que

$$N_f = \frac{I}{E} = \frac{3 \times 10^{-3}}{9,95 \times 10^{-19}} \approx 3,017 \times 10^{15} \frac{\text{fotones}}{\text{m}^2\text{s}} .$$

- (b) El momento del fotón puede calcularse a partir de

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{6,63 \times 10^{-34}}{2 \times 10^{-7}} \approx 3,31 \times 10^{-27} \text{ kg}\cdot\text{m/s}$$

- (c) Finalmente la energía cinética de los fotoelectrones emitidos, de acuerdo a la expresión (1.10), vendrá dada por

$$E_c = h\nu - \Phi_e = 6,21 \text{ eV} - 1 \text{ eV} = 5,21 \text{ eV} .$$

1.3. Dualidad de la radiación

A la vista de la discusión presentada en el anterior apartado, nos encontramos con que existen dos concepciones distintas de la radiación electromagnética:

- **Onda electromagnética (OEM)**

La visión clásica de la radiación interpreta que ésta es una onda de modo que su energía y momento se distribuye continuamente en el frente de ondas. Según hemos visto, la intensidad de la onda, I , puede relacionarse con la amplitud del campo eléctrico, $\mathcal{E}_0$, mediante

$$I = \frac{1}{2} \epsilon_0 c \mathcal{E}_0^2 .$$

- **Fotones**

Según la interpretación de Einstein, la radiación electromagnética puede considerarse como un conjunto discreto de paquetes de energía $E = h\nu$, de modo que la intensidad de la radiación, de acuerdo con (1.11), puede escribirse como

$$I = N_f \hbar \omega .$$

Según la visión clásica, la intensidad de la onda depende del valor de la amplitud del campo eléctrico y según la interpretación fotónica, del número de fotones. En consecuencia, podemos observar que el número de fotones debe ser proporcional al cuadrado de la amplitud del campo eléctrico,

$$N_f \propto \mathcal{E}_0^2 , \quad (1.14)$$

donde debemos interpretar esta densidad de fotones, N_f , en términos puramente probabilísticos. Este hecho nos permite establecer un punto común de relación entre las visiones clásica y fotónica de la radiación y establecer, en general, que

el cuadrado de la amplitud del campo eléctrico de la onda electromagnética, $\mathcal{E}_0^2(\mathbf{r}, t)$, es proporcional a la probabilidad de localizar en un instante t a los fotones en un dV centrado en el punto $\mathbf{r}$.

Desde el punto de vista del modelo fotónico, el campo eléctrico de la onda electromagnética juega el papel de una función matemática que determina la probabilidad de encontrar a los fotones en un determinado punto e instante. En aquellos puntos donde el campo eléctrico tenga un valor alto de amplitud será, por tanto, más probable encontrar fotones que allí donde la amplitud presente un valor bajo. En la práctica, la conveniencia de usar uno de los dos modelos (OEM/fotones) vendrá determinada por la relación entre la cantidad

de energía de los fotones y la energía puesta en juego en la posible interacción. Si la energía en la interacción, ΔE , es del orden de la energía de los fotones, $h\nu$, entonces se debe usar el modelo fotónico. Por el contrario, si $\Delta E \gg h\nu$ (esto es, si en la interacción intervienen muchos fotones conjuntamente), el modelo ondulatorio será más apropiado.

1.4. Modelo atómico de Bohr

En este apartado discutiremos el modelo que propuso N. Bohr en 1913 para el átomo de hidrógeno. Este modelo fue propuesto como consecuencia de los problemas que presentaba el modelo nuclear de Rutherford (este modelo se supone conocido por el alumno). En concreto, Rutherford propuso un modelo “planetario” del átomo compuesto por un sistema de cargas globalmente neutro donde supuso que existía un núcleo de carga positiva muy pequeño y muy másico rodeado de cargas negativas (electrones) de muy poca masa “orbitando” continuamente a su alrededor. Este modelo, muy válido en cuanto a la idea de un átomo formado por un núcleo y electrones a su alrededor, presentaba dos problemas fundamentales:

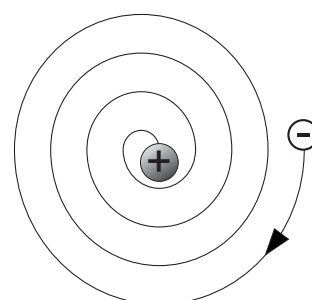
1. Inestabilidad del átomo.

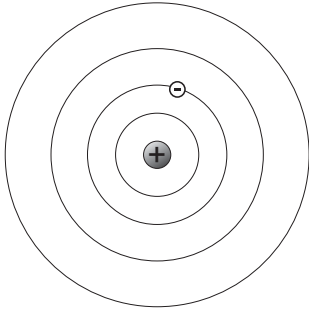
Según la teoría clásica del Electromagnetismo, una carga acelerada radia y como los electrones orbitando en torno al núcleo describen un movimiento acelerado, estos electrones debían estar radiando. Si estos electrones radian energía, esto significa que debían estar perdiendo energía cinética de forma continua, lo que a su vez implica que tras un breve lapso de tiempo los electrones deberían colapsar en el núcleo. Este razonamiento clásico conduce inevitablemente a un átomo inestable con todos los electrones “atrapados” en el núcleo, en abierta contradicción con las suposiciones iniciales de un núcleo de carga positiva en torno al cual los electrones orbitan de forma estable.

2. Emisión de un espectro continuo.

Según el razonamiento clásico anterior, la radiación emitida por el átomo debía ser continua, puesto que la supuesta pérdida de energía cinética del electrón en forma de radiación electromagnética se realizaría de forma continua. Esta suposición es de nuevo contraria al hecho experimental de que las sustancias formadas por elementos puros emiten un espectro discreto.

Basado en el modelo de Rutherford e incorporando la concepción fotónica de la radiación propuesta por Einstein, Bohr propuso un sorprendente modelo para el átomo de hidrógeno (el átomo más simple de la naturaleza, compuesto únicamente por dos cargas: una positiva en el núcleo –protón– y otra negativa –electrón– orbitando a su alrededor) basado en los siguientes tres postulados:

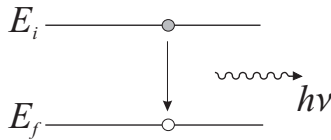




1. En vez de las infinitas órbitas, con cualquier valor de radio, que son permitidas por la Física Clásica, los electrones pueden tomar únicamente aquellas órbitas en las que se verifique que el módulo de su momento angular, L ($\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$, por lo que $L = m_e v r$ siendo $m_e = 9,1 \times 10^{-31}$ kg la masa del electrón, v el módulo de la velocidad y r el valor del radio), sea un múltiplo de $\hbar$:

$$L = m_e v r = n \hbar \quad , \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1.15)$$

2. Un electrón en una de las órbitas anteriores no emite radiación electromagnética. Estas órbitas corresponden por tanto a **estados estacionarios**, es decir, estados en los que la energía del átomo es constante en el tiempo.
3. Si un electrón está inicialmente en una órbita de energía E_i y transita hacia una órbita de menor energía E_f , se emite radiación electromagnética (un fotón) de frecuencia



$$\nu = \frac{E_i - E_f}{h} \quad (1.16)$$

Consecuencias del modelo de Bohr

Los postulados propuestos por Bohr conducen a las siguientes consecuencias:

■ Radio de las órbitas permitidas

Para un electrón que esté situado en una órbita estacionaria de radio r debe cumplirse que los módulos de la fuerza centrífuga, F_c , y la de atracción electrostática del núcleo, F_e , se compensen, esto es,

$$F_c = F_e \quad (1.17)$$

o equivalentemente

$$\frac{m_e v^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \quad (1.18)$$

Si tenemos en cuenta la expresión (1.15), podemos escribir

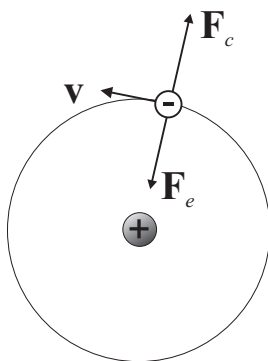
$$\frac{m_e}{r} \frac{n^2 \hbar^2}{m_e^2 r^2} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \quad (1.19)$$

de donde obtenemos finalmente, al despejar el radio, que

$$r_n = n^2 r_0 = r_0, 4r_0, 9r_0, \dots \quad (1.20)$$

siendo

$$r_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{e^2 m_e} \approx 0,53 \text{ \AA} \quad (1.21)$$



Radio de las orbitas
estacionarias del hidrógeno

($1\text{\AA} = 10^{-10}\text{ m}$).

El electrón en el átomo de hidrógeno sólo puede tomar aquellas órbitas *discretas* cuyos radios verifiquen (1.20). Dado que la menor órbita que puede tomar el electrón en el átomo de hidrógeno es r_0 , este dato podría ser considerado como el “tamaño” de dicho átomo. Comprobaciones experimentales demuestran que r_0 coincide muy aproximadamente con el tamaño medido para el radio de los átomos de hidrógeno.

■ Cuantización de la energía del átomo de H

En una órbita estacionaria, y que por tanto verifica (1.18), debe cumplirse que

$$m_e v^2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} . \quad (1.22)$$

La energía, E , del electrón en una órbita estacionaria (y, en consecuencia, en un *estado estacionario*) será la suma de su energía cinética, E_c , más la energía potencial electrostática, E_p , debido al efecto de carga positiva del núcleo, esto es,

$$E = E_c + E_p = \frac{1}{2}m_e v^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} ,$$

expresión que puede reescribirse, teniendo en cuenta (1.22), como

$$E = -\frac{1}{2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} . \quad (1.23)$$

Dado que el radio de la órbita está cuantizado ($r_n = n^2 r_0$), la energía del estado estacionario lo estará igualmente. En consecuencia la energía del estado estacionario caracterizado por el **número cuántico** n puede escribirse como

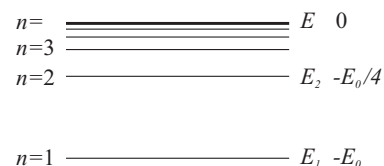
$$E_n = -\frac{E_0}{n^2} = -E_0, -\frac{E_0}{4}, -\frac{E_0}{9}, \dots , \quad (1.24)$$

donde E_0 es la energía del **estado elemental** del átomo de hidrógeno ($n = 1$), que viene dada por

$$E_0 = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r_0} = \frac{e^4 m_e}{8\epsilon_0^2 h^2} \approx 13,6\text{ eV} . \quad (1.25)$$

Los posibles estados de energía con $n > 1$ se conocen como **estados excitados**. El hecho de que la energía de los distintos estados sea *negativa* debe entenderse en el sentido de que hay que proporcionar energía para “sacar” al electrón de esos estados, esto es, el electrón está ligado al átomo de hidrógeno por esa cantidad de energía. En este sentido, podemos decir que la *energía de ionización* del átomo de hidrógeno es de 13.6 eV; es decir, hay que dar al menos esa energía al átomo de H en su estado fundamental para poder extraerle el electrón.

Energía de los estados estacionarios del H



■ Espectro del hidrógeno

Teniendo en cuenta la hipótesis (1.16) junto con la expresión (1.24) obtenida anteriormente, la frecuencia de la radiación emitida en la transición de un electrón desde un estado caracterizado por n_i hasta otro estado de menor energía caracterizado por n_f vendría dada por

$$\nu = \frac{-\frac{E_0}{n_i^2} + \frac{E_0}{n_f^2}}{h} = \frac{E_0}{h} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right), \quad (1.26)$$

o equivalentemente, teniendo en cuenta que $\lambda\nu = c$,

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{E_0}{hc} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right), \quad (1.27)$$

donde $E_0/hc \approx 1,0974 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$. Esta expresión teórica, obtenida únicamente a partir de las hipótesis de Bohr, coincide plenamente con la fórmula empírica de Rydberg–Ritz (1.1). Si admitimos que esta sorprendente y total coincidencia no es mera casualidad debemos entonces admitir que el modelo de Bohr proporciona un marco teórico novedoso, muy original y consistente para entender el espectro del átomo de hidrógeno. Podemos afirmar, por tanto, que el espectro *discreto* del H es fruto de la *cuantización de los estados energéticos* de este átomo² y de la naturaleza fotónica de la radiación.

Es interesante notar finalmente que, aunque el modelo atómico de Bohr proporcionó un marco teórico muy satisfactorio que pudo explicar las características esenciales del átomo de hidrógeno, cuando este mismo modelo se intentó aplicar a átomos con más de un electrón no resultó tan eficaz. Por ejemplo, este modelo no pudo explicar el valor de la energía de ionización ni el espectro discreto del átomo de helio (el átomo de helio consta ya de dos protones en el núcleo y dos electrones orbitando). Este hecho debe interpretarse en el sentido de que, aunque el modelo de Bohr supuso un avance fundamental en la comprensión del átomo, era un modelo simple que no tenía en cuenta algunas de las propiedades más características (todavía por descubrir) de las partículas cuánticas. Los apartados siguientes explorarán algunas de estas propiedades.

EJEMPLO 1.3 Un átomo de H es excitado de manera que al volver a su estado fundamental (de mínima energía) emite una radiación de frecuencia $\nu = 3,023 \times 10^{15} \text{ Hz}$. Calcule el número cuántico del estado excitado así como su radio.

²Un experimento muy relevante, llevado a cabo en 1914 por J. Frank y G. Hertz, demostró empíricamente que la cuantización de los estados energéticos es una característica común de todos los átomos.

Supuesto que E_n sea la energía del estado excitado de número cuántico n , sabemos que la energía, ΔE , puesta en juego en la transición será

$$\Delta E = E_n - E_0 = h\nu ,$$

por lo que

$$\begin{aligned} E_n &= \Delta E + E_0 = h\nu + E_0 \\ &= 4,135 \times 10^{-15} \text{eVs} \cdot 3,023 \times 10^{15} \text{s}^{-1} - 13,6 \text{eV} = -1,55 \text{eV} . \end{aligned}$$

Para calcular el número cuántico, debemos tener en cuenta que

$$E_n = -\frac{E_0}{n^2} ,$$

por lo que

$$n = \sqrt{\frac{-E_0}{E_n}} = \sqrt{\frac{13,6}{1,55}} = 3 .$$

El electrón fue excitado hasta el estado de número cuántico $n = 3$.

Según el modelo de Bohr, el radio de la órbita del electrón en este estado será

$$r_3 = 9r_0 \approx 4,77 \text{ \AA} .$$

1.5. Dualidad de la materia

1.5.1. Hipótesis de De Broglie

En 1924, L. de Broglie, suponiendo la existencia de una simetría interna en la naturaleza, sugirió que el carácter dual onda / corpúsculo exhibido por los fotones era igualmente aplicable a todas las partículas materiales. En concreto la hipótesis de L. de Broglie fue

El movimiento de una partícula material viene determinado por las propiedades ondulatorias de propagación de una “onda piloto” cuya longitud de onda, λ , y frecuencia, ν , están asociadas con el momento lineal, p , y la energía, E , de la partícula según

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad \text{o bien} \quad p = \hbar k \quad (1.28)$$

$$\nu = \frac{E}{h} \quad \text{o bien} \quad E = \hbar \omega . \quad (1.29)$$

Relaciones de de Broglie

Debe notarse que en la onda piloto asociada a las partículas NO SE CUMPLE que $\lambda = c/\nu$ (esto sólo era válido en ondas electromagnéticas / fotones en el espacio libre). Este hecho podemos relacionarlo con

Para una partícula $\lambda \neq c/\nu$

la expresión de la energía de una partícula libre³, E , proporcionada por la Relatividad Especial,

$$E^2 = m_0^2 c^4 + p^2 c^2, \quad (1.30)$$

donde m_0 es la *masa en reposo* de la partícula material —nótese que para los fotones, cuya masa en reposo es nula, $m_0 = 0$, la expresión anterior se reduce a (1.12). Puede comprobarse que al sustituir (1.28) y (1.29) en (1.30) encontramos una relación entre la λ y la ν de la onda piloto más complicada que la que existe para ondas electromagnéticas.

En el caso de partículas libres cuya velocidad, v , sea mucho menor que la velocidad de la luz ($v^2 \ll c^2$), el Apéndice B muestra que la energía cinética de dicha partícula puede expresarse como

$$E_c = \frac{p^2}{2m_0}, \quad (1.31)$$

por lo que el momento y la longitud de onda de la partícula puede expresarse como

$$p = \sqrt{2m_0 E_c} = mv. \quad (1.32)$$

y

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_0 E_c}}. \quad (1.33)$$

Es interesante resaltar que, debido al pequeño valor de la constante de Planck, los fenómenos típicamente ondulatorios de interferencia y/o difracción de las partículas macroscópicas son prácticamente imposibles de detectar. Dado que la longitud de onda de estas partículas macroscópicas es mucho menor que las distancia típicas en el ámbito macroscópico, podemos “ignorar” el carácter ondulatorio de estas partículas.

EJEMPLO 1.4 Calcular la longitud de onda asociada a (1) una pelota de tenis de $m = 50\text{g}$ y $v = 40\text{m/s}$; y (b) un electrón sometido a un potencial de aceleración $V = 100\text{V}$.

(1) En este caso, el momento lineal es

$$p = mv = 0,05 \cdot 40 = 2 \text{ kg}\cdot\text{m/s}$$

y la longitud de onda será

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{6,6 \times 10^{-34}}{2} \approx 3,3 \times 10^{-34} \text{ m}.$$

Como puede observarse, la longitud de onda asociada a la pelota de tenis es muchísimo más pequeña que el tamaño de un átomo de H. Esta λ es tan pequeña que es totalmente indetectable por cualquier dispositivo experimental. Una posible manera de aumentar esta λ es hacer que la masa de la

³partícula sobre la que no se ejercen fuerzas externas

partícula sea muy pequeña, en la práctica del orden de la masa de las partículas elementales (electrones, protones,)

(2) Si el electrón está sometido a cierto potencial de aceleración, V , entonces, supuesto que parte del reposo, la energía cinética que adquiere será justamente la energía potencial eléctrica que pierde la partícula cargada, esto es,

$$E_c = eV = 100 \text{ eV}.$$

La longitud de onda asociada a esta partícula será entonces

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_e eV}} = \frac{6,6 \times 10^{-34}}{2 \cdot 9,1 \times 10^{-31} \cdot 1,6 \times 10^{-19} \cdot 100} \approx 1,2 \text{ \AA}.$$

Esta longitud de onda es muy pequeña pero al menos es del orden del tamaño de los átomos.

1.5.2. Verificación experimental

Antes de describir el experimento que verificó el carácter ondulatorio de interferencia y/o difracción las partículas materiales, debemos notar que para que un fenómeno ondulatorio sea “observable” es necesario que las dimensiones de los objetos con los que interactúa la onda sean del orden de la longitud de onda. Según ha mostrado el Ejemplo 1.4, la longitud de onda de las partículas elementales puede ser del orden de $\text{\AA}$, por lo que se necesitaría que su onda piloto interactuase con “objetos” de esas dimensiones. Un posible “objeto” que presenta estas dimensiones son los planos atómicos de un monocristal que están separados precisamente distancias del orden de $\text{\AA}$.

Basado en lo anterior, Davisson y Germer verificaron experimentalmente en 1927 el comportamiento ondulatorio de los electrones usando un dispositivo experimental cuyo esquema se muestra en la Fig. 1.1a. En este experimento, un monocristal es bombardeado con electrones

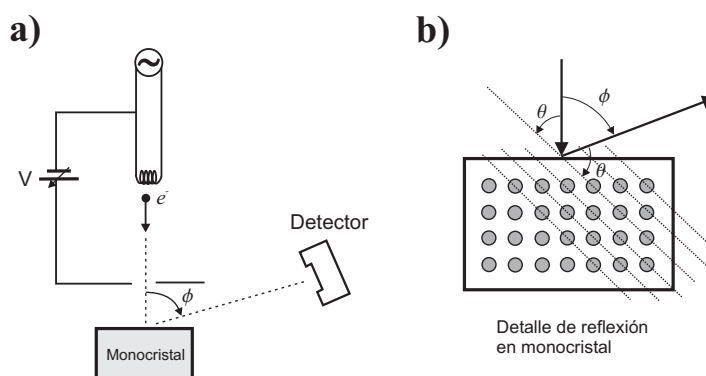


FIGURA 1.1: Experimento de Davisson y Germer

acelerados por un potencial eléctrico V . Estos electrones, previamente emitidos por una resistencia incandescente, adquieren una energía

cinética dada por

$$E_c = eV. \quad (1.34)$$

Si los electrones se comportasen como *partículas*, entonces, tras chocar con el monocristal, rebotarían tal y como lo harían pelotas de tenis que chocasen contra una piedra, esto es, saldrían rebotados en todas direcciones sin que haya direcciones privilegiadas. Además, este efecto sería independiente de la energía cinética de las partículas, esto es, del potencial de aceleración V . No obstante, si los electrones se comportasen como *ondas*, entonces los electrones dispersados lo harían mayoritariamente en aquellas direcciones privilegiadas para las que exista *interferencia constructiva*.

Admitiendo que los electrones presentan un comportamiento ondulatorio, la onda incidente se reflejará en cada uno de los planos atómicos (ver detalle en Fig. 1.1b), existiendo una interferencia constructiva de las ondas reflejadas en planos paralelos consecutivos si se cumple la **condición de Bragg**, esto es, si la diferencia de camino entre los rayos (1) y (2) es justamente un múltiplo de la longitud de onda:

$$2d \sin \theta = n\lambda. \quad (1.35)$$

Supuesta válida la hipótesis de de Broglie, la longitud de onda, λ , de los electrones que inciden en el monocristal será

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m_e eV}}, \quad (1.36)$$

lo que implicaría que el detector mostraría unos máximos de dispersión para los ángulos ϕ_n relacionados con los θ_n ($2\theta_n + \phi_n = \pi$) que verificasen

$$\sin \theta_n = n \frac{h}{2d\sqrt{2m_e eV}}. \quad (1.37)$$

El experimento de Davisson y Germer demostró que esta suposición teórica estaba en excelente acuerdo con la experiencia, confirmando fehacientemente que los electrones (y por ende, todas las partículas materiales) presentaban un carácter ondulatorio.

EJEMPLO 1.5 En un dispositivo experimental como el del experimento de Davisson y Germer, los electrones son acelerados por un potencial V antes de incidir sobre un monocristal de Ni cuya distancia entre planos atómicos es de $0.91\text{\AA}$. Si el detector se sitúa en un ángulo $\phi = 40^\circ$, calcule el valor del potencial de aceleración para el cual se detecta en ese ángulo el máximo de dispersión de primer orden.

Dado que $2\theta + \phi = 180^\circ$, el ángulo θ relacionado con la posición del detector será

$$\theta = \frac{180^\circ - 40^\circ}{2} = 70^\circ.$$

El máximo de dispersión de primer orden ocurre cuando $n = 1$, esto es, para un ángulo θ_1 que verifica

$$\sin \theta_1 = \frac{h}{2d\sqrt{2m_e eV}},$$

o equivalentemente para un potencial de aceleración, V , dado por

$$\begin{aligned} V &= \frac{h^2}{8d^2 \sin^2 \theta_1 m_e e} \\ &= \frac{(6,6 \times 10^{-34})^2}{8 \cdot (0,91 \times 10^{-10})^2 \cdot (0,9397)^2 \cdot 9,1 \times 10^{-31} \cdot 1,6 \times 10^{-19}} \approx 51,1 \text{ V}. \end{aligned}$$

1.5.3. Naturaleza de la onda

En el Apartado 1.3 se discutió que la relación existente entre la interpretación ondulatoria y la corpuscular de la radiación electromagnética podía hacerse mediante la interpretación que se le daba al campo eléctrico en un punto como una medida de la probabilidad de encontrar a los fotones en cierto instante en el entorno de dicho punto. En este sentido, en 1926 Max Born extendió esta interpretación probabilística igualmente al caso de las partículas materiales. Según la interpretación de Born, lo que se está propagando en forma de onda (asociado al movimiento de las partículas) no es algo material sino una magnitud representada matemáticamente por $\Psi(\mathbf{r}, t)$, que se conoce como **función de onda** y que posee el siguiente significado físico:

Si en un instante t se realiza una medida para localizar a la partícula asociada a la función de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$, la probabilidad $P(\mathbf{r}, t)dV$ de encontrar a la partícula en un dV centrado en $\mathbf{r}$ viene dado por

$$P(\mathbf{r}, t)dV = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 dV. \quad (1.38)$$

Dado que la partícula evidentemente debe encontrarse en algún punto del espacio, la probabilidad de encontrar a dicha partícula en algún punto del espacio debe ser la unidad, por lo que debemos imponer la siguiente condición:

$$\int_{\text{todo el espacio}} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 dV = 1, \quad (1.39)$$

que se conoce como condición de normalización.

Analicemos dos casos de interés:

■ Partícula libre

Dado que sobre una partícula libre no se ejercen fuerzas externas, esta partícula no debe encontrarse en ciertos sitios con más probabilidad que en otros. En consecuencia, la probabilidad de encontrarla en alguna posición no debe depender de dicha posición. Por otra parte, una partícula libre tiene perfectamente definido su energía, E , y su momento, p , por lo que de acuerdo a las relaciones de de Broglie ($p = \hbar k$ y $E = \hbar \omega$), su número de ondas y frecuencia están igualmente definidas y, por tanto, es razonable suponer que su función de onda asociada pueda venir dada por

$$\Psi(x, t) = A e^{j(p/\hbar)x} e^{-j(E/\hbar)t} . \quad (1.40)$$

■ Partícula localizada

Si una partícula está localizada existirá entonces más probabilidad de encontrarla en algunos sitios que en otros. Consecuentemente $P(x, t)$ debe depender de la posición, lo cual se puede conseguir si su función de onda asociada, $\Psi(x, t)$, viene dada por un *grupo de ondas*, por lo que podrá expresarse como

$$\Psi(x, t) = \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} A(k) e^{jkx} e^{-j\omega(k)t} dk . \quad (1.41)$$

En este caso, la velocidad de la partícula vendrá determinada por la *velocidad del grupo de ondas*, esto es,

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} . \quad (1.42)$$

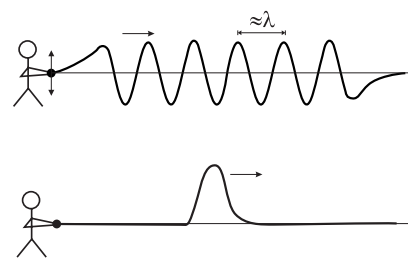
Es interesante resaltar que la función de onda, Ψ , no es una magnitud *estadística*, en el sentido de que describa el comportamiento de un colectivo muy numeroso de partículas que se manifiestan simultáneamente, sino que Ψ es una propiedad intrínseca de cada partícula, independiente del colectivo⁴. En este sentido, la interpretación probabilística de Born nos impone una restricción al conocimiento que podemos tener sobre la partícula, es decir, “todo” lo que nos puede dar la Física Cuántica sobre la posición de una partícula es una información

⁴Cuando decimos que la probabilidad de sacar cara al lanzar una moneda es de $1/2$, estamos diciendo que al lanzar un colectivo numeroso de monedas al aire, muy aproximadamente la mitad de ellas será cara y la otra mitad cruz. Al aplicar esa propiedad a un *elemento* del colectivo, le estamos atribuyendo a éste las propiedades que en realidad sólo posee el colectivo. De hecho, en principio, si supiésemos con exactitud las condiciones que determinan el lanzamiento de una moneda (su posición y momento iniciales), podríamos determinar con precisión el resultado de este evento. Esto NO es lo que ocurre con las partículas cuánticas sino que cada una de ellas individualmente presenta un comportamiento que sólo puede conocerse en forma probabilística

probabilística acerca del posible resultado de una medida. Podemos ver que este hecho dota a nuestro conocimiento sobre la partícula de cierta incertidumbre, hecho que será discutido con más profundidad en el apartado siguiente.

1.6. Principio de Heisenberg

Si una cuerda es agitada de forma periódica, tal como muestra la figura adjunta, y nos planteamos la pregunta de ¿dónde está la onda?, entonces parece razonable responder que la onda está distribuida en toda la cuerda. No obstante, si la pregunta es ¿cuál es la longitud de onda?, entonces la respuesta puede ser más precisa. No obstante, si en vez de agitar la cuerda periódicamente simplemente se ha agitado una vez de modo que se ha generado un pulso que viaja por la cuerda, ahora la pregunta de ¿dónde está la onda? podría ser respondida con cierta precisión mientras que a la pregunta ¿cuál es la longitud de onda? no encontraríamos una respuesta precisa. Esta discusión pone de manifiesto que, en este *fenómeno ondulatorio*, una determinación precisa de la longitud de onda haría más imprecisa la determinación de la posición, y viceversa. Un estudio más riguroso, basado en el análisis de Fourier, nos permitiría establecer que la imprecisión o incertidumbre en la determinación simultánea de los valores de la posición y la longitud de onda es algo inherente a todo fenómeno ondulatorio.

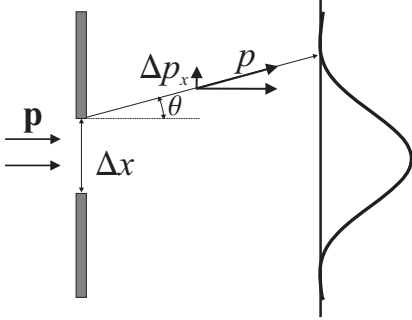


1.6.1. Principio de incertidumbre posición/momento

Si tenemos en cuenta que todo fenómeno ondulatorio estará afectado intrínsecamente por la anterior incertidumbre en la medida de su posición y longitud de onda y lo relacionamos ahora con la existencia de la *dualidad onda/corpusculo* tanto para la radiación como para la materia, parece entonces razonable prever la existencia de incertidumbre en la determinación de ciertas magnitudes físicas en cualquier fenómeno natural. En este sentido, en 1927 W. Heisenberg postuló el siguiente principio para la medida de la posición y el momento de una partícula:

En un experimento NO es posible determinar simultáneamente y con toda precisión una componente del momento de una partícula, por ejemplo p_x , y la posición de la coordenada correspondiente x . Si Δ representa la incertidumbre en la medida, encontraremos que

$$\Delta p_x \Delta x \geq \hbar . \quad (1.43)$$



Una manera de ver que la dualidad onda/corpusculo de la materia está intrínsecamente relacionada con el anterior principio de incertidumbre puede obtenerse a partir de la determinación de la posición de una partícula haciéndola pasar por una rendija de anchura Δx (ésta sería justamente la incertidumbre en su posición). Al pasar por la rendija, la partícula sufriría *difracción* debido a su carácter ondulatorio. El estudio de la difracción de una onda plana que incide normal a la rendija muestra que, para la configuración mostrada en la figura, el primer mínimo de difracción se produce para un ángulo θ tal que

$$\sin \theta = \frac{\lambda}{\Delta x} . \quad (1.44)$$

Dado que la partícula llegará a algún punto comprendido entre los dos mínimos mostrados en la figura, podemos ver que el máximo de incertidumbre de la componente x del momento será

$$\Delta p_x = p \sin \theta , \quad (1.45)$$

donde p es el módulo del momento de la partícula, que no habrá cambiado al atravesar ésta la rendija. Teniendo ahora en cuenta la relación de de Broglie (1.28) y las dos expresiones anteriores, podemos escribir

$$\Delta p_x = \frac{h}{\lambda} \frac{\lambda}{\Delta x} \quad (1.46)$$

y finalmente

$$\Delta p_x \Delta x = h . \quad (1.47)$$

Notemos que el simple análisis anterior, basado en el carácter ondulatorio de la partícula, nos ha conducido a una expresión que relaciona las incertidumbres de la posición y el momento, siendo además congruente con (1.43).

El principio de incertidumbre puede también relacionarse con la existencia de un mínimo de acción, h , descrito en el Apartado 1.2.1. Debe tenerse en cuenta que cualquier *descripción* de un fenómeno requiere cierta *interacción* con dicho fenómeno. Debido a la existencia de un mínimo de acción, esta interacción no puede hacerse infinitesimal, por lo que la correspondiente descripción siempre estará sujeta a cierta incertidumbre.

Es importante destacar tres puntos con respecto al principio de incertidumbre:

1. La existencia de incertidumbre no se debe a deficiencias en la calidad de los aparatos de medida. Incluso con aparatos ideales seguiría existiendo una incertidumbre en la medida determinada por (1.43).
2. El principio de incertidumbre no prohíbe una medida exacta de la posición o el momento. Ahora bien, una medida exacta en la posición (esto es, $\Delta x \rightarrow 0$) implica una incertidumbre *total* en la medida del momento, $\Delta p_x \rightarrow \infty$, y viceversa.

3. La desigualdad (1.43) debe considerarse como algo *intrínseco* y fundamental del comportamiento de la naturaleza.

Consecuencias del principio de incertidumbre posición/momento

Una consecuencia relevante del principio de incertidumbre es que, en un sentido estricto, no podemos seguir hablando de *trayectorias* de las partículas. Notemos que la existencia de una trayectoria definida es simplemente la información *simultánea* y *precisa* acerca de las posiciones y las velocidades (momento) de cierta partícula. Dado que la simultaneidad y precisión de ambas magnitudes no está permitida por (1.43), debemos admitir que el concepto de trayectoria debe ser revisado y usado con mucha prudencia. No obstante, debemos tener en cuenta que más relevante que la incertidumbre absoluta en sí es la incertidumbre relativa, esto es, el cociente entre la incertidumbre y el valor de la magnitud. Veamos este hecho con el siguiente ejemplo.

EJEMPLO 1.6 Calcule la incertidumbre relativa en la determinación del momento para el movimiento de (1) la Luna en su órbita alrededor de la Tierra y (2) el electrón en el átomo de hidrógeno.

■ La Luna

Sabiendo que la masa de la Luna es $m \approx 6 \times 10^{22}$ kg, que su velocidad media es $\bar{v} \approx 10^3$ m/s y que su posición se determina con una incertidumbre de $\Delta x \sim 10^{-6}$ m (con una incertidumbre tan pequeña, Δp_x se maximiza), la incertidumbre en el momento vendrá dada por

$$\Delta p_x \geq \frac{\hbar}{\Delta x} \approx 10^{-28} \text{ kg}\cdot\text{m/s}.$$

Puesto que el momento puede calcularse como

$$p_x = m\bar{v} \approx 10^{25} \text{ kg}\cdot\text{m/s},$$

la incertidumbre relativa será aproximadamente

$$\frac{\Delta p_x}{p_x} \sim \frac{10^{-28}}{10^{25}} \sim 10^{-53}.$$

La incertidumbre relativa para el momento, incluso intentando maximizarla, es tremendamente pequeña; tanto que en la práctica sería totalmente indetectable. Consecuentemente, para el caso de la Luna en su órbita alrededor de la Tierra, el concepto de trayectoria es aplicable.

■ Electrón en átomo de hidrógeno

Con el fin de obtener el mínimo de imprecisión en el momento, supongamos que la imprecisión en la determinación de x es máxima, es decir, que sólo sepamos que el electrón está “dentro” del átomo. Dado que el tamaño del átomo venía dado por r_0 , entonces diremos que $\Delta x \sim r_0 \approx 10^{-10}$ m y, por tanto,

$$\Delta p_x \geq \frac{\hbar}{\Delta x} \approx 10^{-24} \text{ kg}\cdot\text{m/s}.$$

Nótese que la incertidumbre absoluta en el momento es mayor para el electrón que para la Luna. Para calcular p , tengamos en cuenta que la energía cinética, E_c , del electrón en la órbita fundamental será

$$E_c = E_0 / 2 \sim 7\text{eV} \sim 1,12 \times 10^{-18}\text{J},$$

por lo que

$$p = \sqrt{2m_e E_c} \sim \sqrt{2 \cdot 9,3 \times 10^{-31} \cdot 1,12 \times 10^{-18}} \sim 2 \times 10^{-24} \text{ kg}\cdot\text{m/s}.$$

La incertidumbre relativa en el momento será entonces

$$\frac{\Delta p_x}{p_x} \sim \frac{10^{-24}}{2 \times 10^{-24}} \sim 0,5,$$

esto es, una incertidumbre relativa muy importante, lo que indica claramente que no podríamos hablar de la trayectoria del electrón en el átomo de H.

Otra consecuencia importante del principio de incertidumbre es que *no existe reposo para las partículas localizadas*. Supongamos una partícula que está localizada en cierta región $0 \leq x \leq a$. Ciertamente, la máxima incertidumbre en la localización de esta partícula es

$$(\Delta x)_{\max} = a,$$

y, en consecuencia, la mínima incertidumbre en el momento será

$$(\Delta p_x)_{\min} = \frac{h}{a}.$$

Teniendo en cuenta que el mínimo valor del momento, $p_{\min}$, debe ser del orden del mínimo valor de su incertidumbre, entonces tenemos que

$$p_{\min} \sim (\Delta p_x)_{\min},$$

por lo que la energía cinética mínima de la partícula tomará el valor

$$(E_c)_{\min} = \frac{p_{\min}^2}{2m} \sim \frac{h^2}{2ma^2}, \quad (1.48)$$

esto es, una partícula localizada no puede estar en reposo (con energía cinética nula).

1.6.2. Principio de incertidumbre energía-tiempo

Al igual que existe un principio de incertidumbre para la posición y el momento, podemos encontrar un principio de incertidumbre para la energía y el tiempo. Este principio puede enunciarse como sigue

Principio de incertidumbre
energía-tiempo

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar, \quad (1.49)$$

donde ΔE debe entenderse como la incertidumbre energética asociada a la energía puesta en juego en cierta transición y Δt como el intervalo de tiempo que tarda el sistema en realizar dicha transición.

El principio de incertidumbre energía–tiempo puede también interpretarse diciendo que una determinación de la energía de un sistema que presente una incertidumbre, ΔE , debe tomar al menos un intervalo de tiempo

$$\Delta t \geq \frac{\hbar}{\Delta E}.$$

Análogamente, si un sistema permanece en cierto estado durante un tiempo no mayor que Δt , la energía en ese estado presentará una incertidumbre de al menos

$$\Delta E \geq \frac{\hbar}{\Delta t}.$$

Cuando hablamos de la “incertidumbre en la energía de cierto estado” debe entenderse que nos referimos a la incertidumbre en la energía puesta en juego en la transición a otro estado de referencia, usualmente el estado fundamental.

EJEMPLO 1.7 Se sabe que el tiempo de vida media, τ , de cierto estado atómico es de $100 \mu\text{s}$. Determine (1) la incertidumbre en la energía de dicho estado y (2) la incertidumbre en la longitud de onda de la radiación emitida en la transición hacia el estado fundamental, sabiendo que en ésta se emite una radiación de $\lambda = 100 \text{ nm}$.

1. El *tiempo de vida media* es una medida del tiempo que tarda en realizarse cierta transición, por lo que podemos identificar $\Delta t \equiv \tau$. La incertidumbre en la energía puesta en juego en la transición será entonces

$$\Delta E \geq \frac{\hbar}{\Delta t} \geq \frac{1,009 \times 10^{-34}}{10^{-4}} \gtrsim 10^{-20} \text{ J} \approx 6,25 \times 10^{-2} \text{ eV}.$$

2. En la transición hacia el estado fundamental se emitirá un fotón de energía $E = h\nu$, cuya incertidumbre ΔE corresponde a la calculada anteriormente. La longitud de onda de la radiación emitida será

$$\lambda = \frac{hc}{E},$$

por lo que la incertidumbre en la longitud de onda, $\Delta\lambda$, vendrá dada por

$$\begin{aligned} \Delta\lambda &= \left| \frac{d\lambda}{dE} \right| \Delta E = \frac{hc}{E^2} \Delta E = \frac{\lambda^2}{hc} \Delta E \\ &= \frac{(100 \times 10^{-9})^2}{6,6 \times 10^{-34} \cdot 3 \times 10^8} 10^{-20} \approx 5 \text{ Å}. \end{aligned}$$

En este caso la incertidumbre relativa en la longitud de onda es bastante pequeña

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} = \frac{0,5 \text{ nm}}{100 \text{ nm}} = 0,005.$$

1.7. Problemas propuestos

1.1: La longitud de onda, $\lambda_{\max}$, para la cual la radiancia espectral de un cuerpo negro es máxima viene dada por la ley de Wien, que establece

$$\lambda_{\max} T = 2,898 \times 10^{-3} \text{ m} \cdot \text{K},$$

donde T es la temperatura absoluta del cuerpo negro. Sabiendo que la temperatura de la superficie del Sol es aproximadamente 5800 K, **(a)** calcular la longitud de onda de la radiación más intensa emitida por el Sol. **(b)** ¿A qué parte del espectro pertenece esta radiación?

Sol. $\lambda_{\max} \approx 500 \text{ nm}$ (espectro visible).

1.2: Si el ojo humano empieza a detectar luz amarilla de longitud de onda 5890 Å a partir de una potencia de $3,1 \times 10^{-16} \text{ W}$, ¿Cuál es el número mínimo de fotones que deben incidir en el ojo para la luz amarilla se vea?.

Sol. ≈ 923 fotones.

1.3: Una superficie de potasio se encuentra a 75 cm de distancia de una bombilla de 100 W. Suponiendo que el rendimiento luminoso de la bombilla es del 5 % y que cada átomo de potasio presenta una superficie efectiva equivalente a un círculo de 1 Å de diámetro, calcule el tiempo requerido por cada átomo para absorber una energía igual a la de su función trabajo ($\Phi_e = 2,0 \text{ eV}$), de acuerdo con la interpretación ondulatoria de la luz.

Sol. $t = 57,6 \text{ s}$

1.4: Una radiación de $2,5 \times 10^{15} \text{ Hz}$ incide sobre una superficie metálica cuya frecuencia umbral es de $9 \times 10^{14} \text{ Hz}$. Calcular la velocidad de los fotoelectrones emitidos. ¿Qué ocurriría si la radiación incidente fuese de $8,5 \times 10^{14} \text{ Hz}$?

Sol. $v = 1,52 \times 10^6 \text{ m/s}$.

1.5: **(a)** Calcular la longitud de onda máxima de la luz que hará funcionar una célula fotoeléctrica dotada de un cátodo de tungsteno sabiendo que los fotoelectrones poseen una energía cinética de 5.5 eV cuando son arrancados por una luz de $\lambda = 1200 \text{ Å}$. **(b)** Si esta radiación de $\lambda = 1200 \text{ Å}$ e intensidad $I = 2,5 \text{ W/m}^2$ incide sobre la célula fotoeléctrica de 30 mm^2 de superficie, siendo el rendimiento cuántico del 20 %, ¿cuál sería la intensidad, i , de la corriente eléctrica producida?.

Sol. **(a)** $\lambda_{\max} = 2570 \text{ Å}$; **(b)** $i = 1,45 \mu\text{A}$.

1.6: Para una radiación de 1500 Å que incide sobre una superficie de aluminio que tiene una función trabajo de 4.2 eV, calcule **(a)** La energía cinética máxima de los fotoelectrones emitidos; **(b)** el potencial de frenado; **(c)** la frecuencia de corte del aluminio.

Sol. **(a)** 4.09 eV; **(b)** 4.09 V; **(c)** $1,01 \times 10^{15} \text{ Hz}$.

1.7: Se emite un haz de fotones mediante una transición electrónica entre los niveles $E_2 = 8 \text{ eV}$ y $E_1 = 2 \text{ eV}$. Este haz luminoso de potencia $P = 10 \mu\text{W}$ incide sobre un metal cuyo trabajo de extracción es $\phi_e = 2,5 \text{ eV}$, originando la emisión de electrones por efecto fotoeléctrico con rendimiento $\rho = 0,8$ (número de electrones emitidos / número de fotones incidentes). Calcular: **(a)** la energía, frecuencia y cantidad de movimiento de los fotones; **(b)** la energía cinética de los fotoelectrones; y **(c)** el número de ellos que son emitidos por segundo.

Sol. **(a)** $\nu = 1,45 \times 10^{15} \text{ Hz}$; **(b)** $p = 3,2 \times 10^{-27} \text{ kg} \cdot \text{m/s}$; **(c)** $E_c = 3,5 \text{ eV}$; $N = 8 \times 10^{12}$.

1.8: Se consideran los rayos X producidos debidos a la transición de los niveles $E_2 = 6,33 \text{ KeV}$ y $E_1 = 2 \text{ KeV}$. Determinar: **(a)** la frecuencia de dichos fotones; **(b)** la potencia emitida (en mW) cuando el número de transiciones por segundo es $N = 10^{14} \text{ s}^{-1}$; y **(c)** la distancia (en Å) entre dos planos reticulares contiguos de un monocristal, sabiendo que la reflexión de primer orden de esta radiación se produce con un ángulo de $\theta = 45^\circ$.

Sol. **(a)** $\nu = 1,05 \times 10^{18} \text{ Hz}$; **(b)** $P = 69 \text{ mW}$; **(c)** $d = 2,02 \text{ Å}$.

1.9: Se ilumina con luz de 280 nm la superficie de una aleación metálica rodeada de oxígeno. A medida que la superficie se oxida, el potencial de frenado cambia de 1.3 a 0.7 eV. Determinar qué cambios se producen en: **(a)** la energía cinética máxima de los electrones emitidos por la superficie; **(b)** la función de trabajo; **(c)** la frecuencia umbral; y **(d)** la constante de Planck.

Sol. **(a)** E_c disminuye en 0,6 eV; **(b)** Φ_e aumenta en 0.6 eV; **(c)** ν_0 aumenta en $1,46 \times 10^{14}$ Hz; **(d)** h no varía.

1.10: Experimentalmente se observa que no todos los fotones que chocan contra la superficie metálica son capaces de extraer un fotoelectrón. En un experimento, luz de longitud de onda 4366 Å ilumina una superficie de sodio de función trabajo 2.5 eV dando lugar a una emisión de $8,3 \times 10^{-3}$ C/J. ¿Cuántos fotones se requieren para emitir un fotoelectrón?.

Sol. ≈ 365 fotones.

1.11: Suponer un átomo de hidrógeno en el estado $n = 2$ y un electrón en órbita circular. Determinar: **(a)** el radio de la órbita; **(a)** la energía potencial eléctrica; **(a)** la energía cinética; y **(a)** la energía total del electrón en esa órbita.

Sol. **(a)** $r = 2,12 \text{ Å}$; **(b)** $E_p = -6,79 \text{ eV}$; **(c)** $E_c = 3,39 \text{ eV}$; **(d)** $E = 3,39 \text{ eV}$.

1.12: ¿Cuál es el mínimo potencial de aceleración capaz de excitar un electrón para sacar un átomo de Hidrógeno de su estado fundamental?

Sol. $V_a = 10,2 \text{ V}$.

1.13: En una transición a un estado de energía de excitación de 10.19 eV, un átomo de hidrógeno emite un fotón cuya longitud de onda es de 4890 Å. Determinar la energía del estado inicial del que proviene la desexcitación y los números cuánticos de los niveles energéticos inicial y final. ¿A qué transición corresponde?.

Sol. $4 \rightarrow 2$.

1.14: ¿Cuál es el mayor estado que pueden alcanzar átomos no excitados de hidrógeno cuando son bombardeados con electrones de 13.2 eV?

Sol. $n = 5$.

1.15: Si la vida promedio de un estado excitado del hidrógeno es del orden de 10^{-8} s, estimar cuántas revoluciones da un electrón cuando se encuentra inicialmente **a)** en el estado $n = 2$ y **b)** en el estado $n = 15$, antes de experimentar una transición al estado fundamental. **c)** Comparar estos resultados con el número de revoluciones que ha dado la Tierra en sus dos mil millones de años existencia.

Sol.: **a)** $8,22 \times 10^6$ órbitas; **b)** $1,95 \times 10^4$.

1.16: Calcular la energía, el momento lineal y la longitud de onda del fotón que es emitido cuando un átomo de hidrógeno sufre una transición desde el estado 3 al estado fundamental.

Sol.: $E = 12,07 \text{ eV}$, $p = 6,44 \times 10^{-27} \text{ kg}\cdot\text{m/s}$, $\lambda = 1030 \text{ Å}$.

1.17: Para transiciones en átomos de hidrógeno correspondientes a $\Delta n = 1$, demuestre que para valores muy grandes de n , la energía de la transición viene dada por $\Delta E = \alpha^2(m_e c^2 / n^3)$, siendo α una constante adimensional, $\alpha = 2\pi \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\hbar c} \right)$, cuyo valor numérico es $1/137$.

1.18: Compare la frecuencia de revolución en el átomo de hidrógeno con la frecuencia del fotón emitido en una transición para la que $\Delta n = 1$ cuando los estados iniciales son **a)** $n = 10$, **b)** $n = 100$ y **c)** $n = 1000$.

Sol.: A medida que n aumenta ambos valores se aproximan.

1.19: Un haz de partículas α ($q=+2e$), que es acelerado mediante una diferencia de potencial de 10 V, incide sobre un cristal de NaCl ($d = 2,82 \text{ Å}$). ¿Cuál es el máximo orden de la reflexión de Bragg que puede ser observada?.

Sol.: $n_{\max} = 125$.

1.20: Si un haz monocromático de neutrones ($m_n = 1,67 \times 10^{-27}$ kg) incide sobre un cristal de berilio cuyo espaciado entre planos atómicos es de 0,732 Å, ¿cuál será el ángulo entre el haz incidente y los planos atómicos que dé lugar a un haz monocromático de neutrones de longitud de onda 0,1 Å?

Sol.: 3,9°.

1.21: El límite de resolución de un aparato es del mismo orden de magnitud que la longitud de onda usada para “ver” los objetos bajo estudio. Para un microscopio electrónico que opera a 60000 V, ¿cuál es el tamaño mínimo del objeto que puede ser observado con este microscopio?

Sol.: $d \sim 0,05 \text{ Å}$.

1.22: Un electrón, un neutrón y un fotón tienen la misma longitud de onda, $\lambda = 1 \text{ Å}$. Calcule y compare la frecuencia y energía de cada cual.

Sol. electrón: $\nu = 3,64 \times 10^{16} \text{ Hz}$, $E = 151 \text{ eV}$; neutrón: $\nu = 1,98 \times 10^{13} \text{ Hz}$, $E = 8,2 \times 10^{-2} \text{ eV}$; fotón: $\nu = 3 \times 10^{18} \text{ Hz}$, $E = 1,24 \times 10^4 \text{ eV}$.

1.23: ¿Cuál es la incertidumbre en la posición de un fotón de longitud de onda 3000 Å, si su longitud de onda se conoce con una precisión de una parte en un millón?

Sol. $\Delta x \geq 50 \text{ mm}$.

1.24: La posición de una partícula se mide al paso de ésta por una ranura de anchura d . Hallar la correspondiente incertidumbre en el momento de la partícula.

Sol. $\Delta p_x \sim h / \Delta x$.

1.25: ¿Cuál será la incertidumbre en la posición de un electrón que ha sido acelerado mediante una diferencia de potencial $V = 1000 \pm 0,1$?

1.26: Si el ancho de energía de un estado excitado de un sistema es de 1.1 eV. **(a)** ¿Cuál es el promedio de duración en ese estado?; **(b)** Si el nivel de energía de excitación del estado del sistema fuera de 1.6 keV, ¿cuál es la mínima incertidumbre en la longitud de onda del fotón emitido cuando el estado excitado decaiga?

Sol. (b) $\Delta \lambda \approx 5 \times 10^{-3} \text{ Å}$.

1.27: La ley de conservación de la energía sólo puede verificarse dentro de los límites de la incertidumbre de la medida, ΔE . Consecuentemente esta ley podría ser *violada* si el intervalo de tiempo es suficientemente corto. ¿Durante qué máximo intervalo de tiempo puede violarse la conservación de la energía de un sistema en **(a)** el doble de la energía correspondiente a un electrón en reposo, mc^2 (lo que corresponde a un fotón que produce espontáneamente un par electrón-positrón); **(b)** el doble de la energía asociada a la masa en reposo de un protón ?.

Sol. (a) $1,27 \times 10^{-21} \text{ s}$.

1.28: Un átomo emite fotones de luz verde, $\lambda = 5200 \text{ Å}$ durante un intervalo $\tau = 2 \times 10^{-10} \text{ s}$. Estime la dispersión, $\Delta \lambda$, en la longitud de onda de la luz emitida.

Sol. $\Delta \lambda \gtrsim 7,17 \times 10^{-13} \text{ m}$.

Constantes: $c = 3 \times 10^8 \text{ m/s}$, $1 \text{ eV} = 1,6 \times 10^{-19} \text{ J}$; $h = 6,6 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s} = 4,1 \times 10^{-15} \text{ eV}\cdot\text{s}$; $m_e = 9,1 \times 10^{-31} \text{ kg}$.

Capítulo 2

Ecuación de Schrödinger. Aplicaciones

2.1. Ecuación de Schrödinger

La primera formulación que se realizó de la teoría cuántica aportó una visión novedosa y revolucionaria de multitud de fenómenos. No obstante, esta teoría presentaba una serie de inconvenientes, entre los que cabe destacar lo siguiente:

- Sólo era aplicable a sistemas periódicos.
- No explicaba las diferentes probabilidades de transición entre distintos niveles energéticos.
- No explicaba el espectro de los átomos multielectrónicos.
- Asignaba trayectorias a los electrones, lo cual es incompatible con el principio de incertidumbre.

Básicamente, lo que faltaba era una teoría unificadora que diera cuenta de los diversos fenómenos cuánticos, a saber: dualidad onda/corpusculo de la radiación/materia, principio de incertidumbre, naturaleza probabilística de los fenómenos, etc.

Tal como ya se apuntó en el Apartado 1.5.3, la descripción de los fenómenos cuánticos se realizará a través de una función de onda, $\Psi(\mathbf{r}, t)$, que describe completamente el estado de un sistema dado. A partir de esta función de onda se podrán obtener los valores medios de las distintas magnitudes observables asociadas al sistema así como la probabilidad de encontrar a las partículas en distintos puntos del espacio. Puede, por tanto, concluirse que

el problema central de la teoría cuántica es la determinación de la función de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$.

Ecuación de Schrödinger para un sistema monodimensional

En 1925, E. Schrödinger planteó como un *postulado* la ecuación diferencial que permite calcular la función de onda, $\Psi(\mathbf{r}, t)$, cuando se conoce la energía potencial, $E_p(\mathbf{r}, t)$ (o a menudo simplemente *potencial*), de la que derivan las interacciones que actúan sobre el sistema. Para el caso de un sistema *monodimensional*, la ecuación de Schrödinger para la función de onda $\Psi(x, t)$ es

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + E_p(x, t) \Psi = j\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} . \quad (2.1)$$

Es interesante notar que la solución de esta ecuación será, en general, una función *compleja* debido a la aparición de la unidad imaginaria, j , en el segundo miembro. Esto implica que el uso de funciones complejas no será un recurso matemático (tal como se hace, por ejemplo, en el estudio de corriente alterna y en las ondas en Física Clásica) sino que, por el contrario, forma parte esencial de la propia teoría.

La función de onda $\Psi(x, t)$ debe cumplir las siguientes condiciones:

- Tanto $\Psi(x, t)$ como su derivada espacial deben ser funciones continuas, finitas y monoevaluadas.
- De acuerdo a la expresión (1.39), debe cumplirse la siguiente condición de normalización (ver Apéndice C):

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) dx = 1 , \quad (2.2)$$

que nos dice que la probabilidad de encontrar a la partícula en algún punto x debe ser igual a la unidad (es decir, la partícula debe estar en algún sitio).

A partir de la expresión (1.38), podemos establecer que

$$\Psi^*(x, t) \Psi(x, t) dx = \left\{ \begin{array}{l} \text{probabilidad de encontrar a la} \\ \text{partícula en el instante } t \\ \text{entre } x \text{ y } x + dx \end{array} \right\} , \quad (2.3)$$

por lo que el *valor esperado*¹ en una posible medición de la posición de la partícula vendrá dado por

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* x \Psi dx \quad (2.4)$$

(en analogía con la expresión (C.5) del Apéndice C). Para cualquier otra magnitud, $f(x)$, que sea función de x , su valor esperado podrá calcularse mediante

$$\langle f(x) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* f(x) \Psi dx . \quad (2.5)$$

¹En el contexto de la Física Cuántica, el *valor esperado* es el promedio de los valores de una serie de medidas repetidas sobre un conjunto de sistemas idénticamente preparados. No es el promedio de los valores de una serie de medidas repetidas sobre un único y mismo sistema

Estados estacionarios

Existen multitud de situaciones en las cuales la energía potencial, E_p , del sistema no depende del tiempo sino únicamente de la posición de los distintos componentes del sistema, en cuyo caso tendremos que $E_p = E_p(x)$ (por ejemplo, la energía potencial electrostática)². Para estas situaciones encontramos que la función de onda puede escribirse como el producto de dos funciones $\psi(x)$ y $g(t)$, de modo que $\Psi(x, t) = \psi(x)g(t)$. Al sustituir esta forma de la función de onda en la ecuación (2.1), obtenemos que

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[g(t) \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} \right] + g(t) E_p(x) \psi(x) = j\hbar \left[\psi(x) \frac{dg(t)}{dt} \right],$$

que tras dividir ambos miembros por $\psi(x)g(t)$ queda como

$$\frac{1}{\psi(x)} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + E_p(x) \psi(x) \right] = \frac{1}{g(t)} \left[j\hbar \frac{dg(t)}{dt} \right]. \quad (2.6)$$

Notemos que la única posibilidad de que los dos miembros de la ecuación anterior sean iguales consiste en que ambos sean idénticos a una constante que denominaremos E de momento. Al igualar cada uno de los miembros de (2.6) a dicha constante obtenemos las dos siguientes ecuaciones diferenciales *ordinarias* acopladas:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + E_p(x) \psi(x) = E \psi(x) \quad (2.7a)$$

$$\frac{dg(t)}{dt} = -\frac{jE}{\hbar} g(t). \quad (2.7b)$$

Es fácil comprobar que la solución a la ecuación (2.7b) viene dada por la función

$$g(t) = e^{-j(E/\hbar)t}. \quad (2.8)$$

Notemos que el factor $E/\hbar$ tiene unidades de inverso de tiempo (o, lo que es lo mismo, de frecuencia), por lo que la constante E tendrá unidades de $\hbar$ por frecuencia, es decir, julios. En consecuencia dicha constante puede identificarse con la *energía* del sistema.

Es importante destacar que la situación anterior en la que la energía potencial no dependía del tiempo da lugar a **estados estacionarios**, esto es, a situaciones que no varían con el tiempo. Para comprobar este hecho basta notar que, teniendo en cuenta (2.8), la función de onda puede escribirse como

$$\Psi(x, t) = \psi(x) e^{-jEt/\hbar}, \quad (2.9)$$

²Recuérdese que en el marco de la Física Clásica, estos sistemas recibían el nombre de *sistemas conservativos*, en los cuales la fuerza que actúa sobre el sistema se calcula a partir del gradiente de la energía potencial, esto es,

$$F(x) = -\frac{dE_p(x)}{dx}.$$

que da lugar a una densidad de probabilidad

$$\begin{aligned} |\Psi(x, t)|^2 &= \Psi^*(x, t)\Psi(x, t) \\ &= \psi^*(x)e^{+jEt/\hbar}\psi(x)e^{-jEt/\hbar} = |\psi(x)|^2 \end{aligned} \quad (2.10)$$

que NO depende del tiempo. En estos estados estacionarios *la energía debe conservarse*, viniendo ésta dada precisamente por la variable E de las ecuaciones (2.7a) y (2.7b).

En lo que sigue, se tratarán únicamente situaciones estacionarias, por tanto, la función de onda $\psi(x)$ y la energía del sistema, E , se obtendrá resolviendo la ecuación (2.7a), esto es,

Ecuación de Schrödinger
independiente del tiempo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + E_p(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (2.11)$$

que se conoce como *ecuación de Schrödinger independiente del tiempo*. Evidentemente la resolución de esta ecuación requiere el conocimiento del potencial, $E_p(x)$, del sistema.

2.2. Partícula ligada. Cuantización

Una vez establecida la ecuación que rige el comportamiento de los sistema estacionarios, procederemos a la resolución de algunas situaciones relevantes. Empezaremos tratando la partícula libre para luego abordar el problema de la partícula en un pozo tanto monodimensional como tridimensional.

2.2.1. Partícula Libre

Para una partícula libre (esto es, una partícula sobre la que no actúan fuerzas externas), la energía potencial no depende de la posición, pudiéndose tomar su valor de referencia como nulo. La ecuación a resolver será, por tanto,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x), \quad (2.12)$$

que puede reescribirse, al redefinir

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad (2.13)$$

o equivalentemente

$$E = \hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad (2.14)$$

como

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0. \quad (2.15)$$

La solución de esta ecuación puede escribirse como

$$\psi(x) = Ae^{ikx},$$

(donde k juega el papel de un número de ondas) por lo que la función de onda vendrá dada por

$$\Psi(x, t) = Ae^{j(kx - Et/\hbar)}. \quad (2.16)$$

Si tenemos en cuenta las relaciones de de Broglie ($E = \hbar\omega$, $p = \hbar k$), podemos comprobar que la solución de la ecuación de Schrödinger para una partícula libre coincide con la expresión obtenida previamente en (1.40) mediante razonamientos puramente heurísticos.

Si en la expresión de la energía de la partícula libre,

$$E = p^2 / 2m,$$

sustituimos el valor de E y p por sus equivalentes según de Broglie, obtenemos que

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m},$$

expresión que es idéntica a (2.14), confirmando así la congruencia de la presente formulación con las hipótesis de de Broglie.

2.2.2. Pozo potencial infinito monodimensional

Existen muchas situaciones prácticas en las cuales una partícula es completamente libre excepto en los *contornos* (o “paredes”) de un recinto donde una fuerza infinita evita que la partícula salga de este recinto. Para el caso monodimensional de un recinto limitado por $0 \leq x \leq a$, la energía potencial de dicho sistema vendrá dada por

$$E_p(x) = \begin{cases} 0, & \text{si } 0 \leq x \leq a \\ \infty, & \text{en otro caso.} \end{cases} \quad (2.17)$$

En el caso de una partícula cuántica sometida a este tipo de potencial, debe cumplirse que la probabilidad de encontrar la partícula fuera del pozo sea nula, esto es,

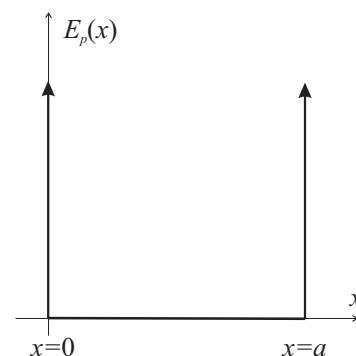
$$\psi(x) = 0 \quad 0 > x > a. \quad (2.18)$$

En el interior del pozo de potencial, dado que la partícula no está afectada por fuerza alguna, la función de onda será la solución de

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0, \quad (2.19)$$

siendo

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad (2.20)$$



el número de ondas asociado. La solución general de la ecuación (2.19) puede expresarse como

$$\psi(x) = Ae^{+jkx} + Be^{-jkx},$$

donde A y B serán dos constantes que se determinarán de acuerdo a las condiciones del problema. En concreto, al aplicar la condición (2.18) al extremo $x = 0$, esto es $\psi(0) = 0$, obtendremos que

$$A + B = 0, \quad \text{por lo que} \quad B = -A.$$

Esta condición hace que la función $\psi(x)$ pueda escribirse como

$$\psi(x) = A(e^{+jkx} - e^{-jkx}) = C \sen kx,$$

donde $C = 2jA$. Al imponer ahora la condición (2.18) en el extremo $x = a$, es decir: $\psi(a) = 0$, tenemos que

$$\sen ka = 0 \quad \Rightarrow \quad ka = n\pi,$$

esto es,

$$k_n = n \frac{\pi}{a}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.21)$$

Es interesante notar que la condición de contorno en $x = a$ no ha fijado el valor de la constante C sino más bien el de la variable k y de aquí que los posibles valores de la energía, teniendo en cuenta (2.20), vengan dados por

Energía de la partícula en un pozo monodimensional

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} = n^2 E_0, \quad n \geq 1. \quad (2.22)$$

La expresión anterior nos dice que la energía de una partícula *cuántica* en un pozo monodimensional de paredes infinitas no puede tomar cualquier valor sino solamente ciertos valores *permitidos*, esto es, **la energía esta cuantizada**. El estado $n = 1$ se denomina *estado fundamental*, siendo su valor de energía E_0 . Los estados con $n > 1$ se denominan *estados excitados*.

El valor de la constante C se determina al imponer la siguiente condición de normalización (2.2):

$$\int_0^a |C|^2 \sen^2(kx) dx = |C|^2 \frac{a}{2} = 1, \quad \text{luego} \quad |C|^2 = \frac{2}{a}.$$

Dentro del pozo, las diferentes soluciones de la función de onda son entonces

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sen\left(\frac{n\pi}{a}x\right), \quad (2.23)$$

donde el número n se denomina **número cuántico** y define el estado de la partícula en el pozo monodimensional.

Es interesante notar que el estado de mínima energía de la partícula en el pozo viene dado por E_0 , lo que significa que el valor de

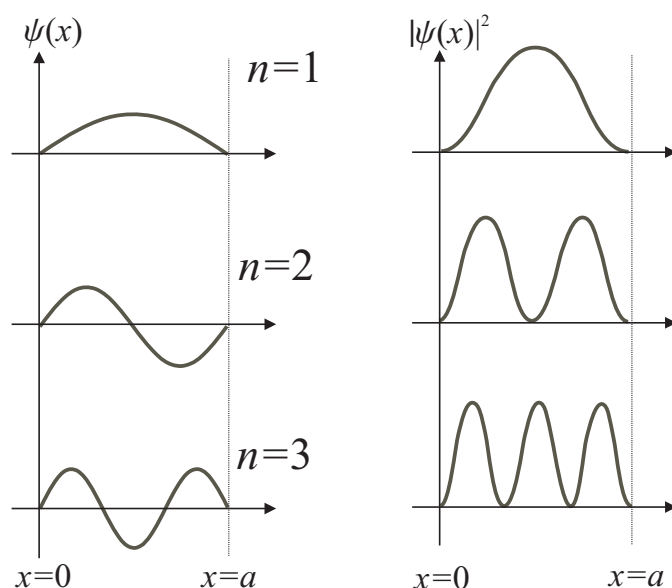


FIGURA 2.1: Aspecto de las funciones de onda y funciones densidad de probabilidad para distintos números cuánticos

mínima energía no es nulo. Este sorprendente hecho ya fue expuesto en el Apartado 1.6.1 como una posible consecuencia del principio de incertidumbre posición / momento. En concreto, la expresión (1.48) establecía que la energía de la partícula en el pozo debía ser

$$E \gtrsim \frac{h^2}{2ma^2} .$$

Este hecho muestra de nuevo que la formulación basada en la ecuación de Schrödinger es congruente con el principio de Heisenberg.

El conjunto de funciones de onda $\{\psi_n(x)\}$ presenta una serie de propiedades interesantes:

- La función de onda $\psi_n(x)$ pasa $n - 1$ veces por cero, esto es, presenta $n - 1$ nodos.
- Son funciones pares o impares con respecto al centro del pozo
- A medida que el número de nodos aumenta, crece el valor de la energía del estado

EJEMPLO 2.1 Calcule la longitud de onda mínima del fotón que debiera ser absorbido para que un electrón situado en el estado fundamental de un pozo monodimensional de paredes infinitas de anchura $a = 2 \text{ \AA}$ transite hasta el tercer estado excitado.

Si la energía del electrón en el estado fundamental en el pozo es

$$E_0 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_e a^2} = \frac{(1,05 \times 10^{-34})^2 \pi^2}{2 \cdot 9,1 \times 10^{-31} \cdot (2 \times 10^{-10})^2} = 1,49 \times 10^{-18} \text{ J} = 9,34 \text{ eV} ,$$

y la energía en el tercer estado excitado ($n = 4$) es, según (2.22),

$$E_4 = 16E_0 = 149,4 \text{ eV} ,$$

la energía, ΔE , necesaria para realizar la transición del estado $1 \rightarrow 4$ vendrá dada por

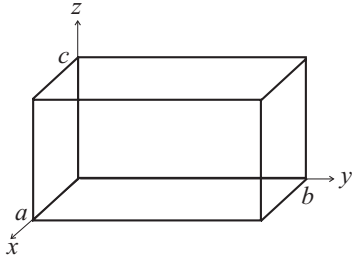
$$\Delta E = (4^2 - 1^2)E_0 = 15E_0 = 2,23 \times 10^{-17} \text{ J} .$$

Teniendo ahora en cuenta que la energía de un fotón es $E = hc/\lambda$, la longitud de onda mínima, $\lambda_{\min}$, de un fotón capaz de producir la transición anterior al ser absorbido será

$$\lambda_{\min} = \frac{hc}{15E_0} = \frac{6,6 \times 10^{-34} \cdot 3 \times 10^8}{2,23 \times 10^{-17}} = 8,86 \text{ nm} .$$

2.2.3. Pozo de potencial tridimensional

Considérese una situación en la que una partícula cuántica está confinada en cierta región del espacio (por ejemplo, un paralelepípedo) de la que no puede salir. Dicha situación podría estar relacionada con la ausencia de fuerzas en el interior de la región y una fuerza infinita en las paredes impenetrables. Este caso, que podría describir la situación de un electrón *libre* en un sólido, estaría caracterizado por la siguiente energía potencial:



$$E_p(x, y, z) = \begin{cases} 0, & \text{si } 0 < x < a, 0 < y < b, 0 < z < c \\ \infty, & \text{en otra parte.} \end{cases} \quad (2.24)$$

Para resolver la ecuación de Schrödinger en este sistema (y así encontrar las funciones de onda y las energías de la partícula), debemos tener en cuenta que ahora la energía potencial depende de las tres variables espaciales x, y y z , es decir, nos enfrentamos a un problema *tridimensional*. Este hecho implica que la ecuación de Schrödinger debe ser extendida al caso tridimensional. Dado que las funciones de onda dependerán de las tres variables espaciales, $\psi = \psi(x, y, z)$, la ecuación de Schrödinger debe incluir derivadas parciales con respecto a cada una de estas variables, por lo que la extensión de la ecuación (2.11) al caso 3D tendría la siguiente forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right] + E_p(x, y, z)\psi = E\psi , \quad (2.25)$$

o bien usando el operador $\nabla^2 \equiv \partial^2 / \partial x^2 + \partial^2 / \partial y^2 + \partial^2 / \partial z^2$,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + E_p(x, y, z)\psi = E\psi . \quad (2.26)$$

Si ahora tenemos en cuenta la forma de la energía potencial dada en (2.24), la ecuación anterior puede reescribirse como

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + k^2 \psi &= 0 \\ 0 < x < a, \quad 0 < y < b, \quad 0 < z < c, \end{aligned} \quad (2.27)$$

donde, de nuevo, k viene dado por (2.20). La ecuación anterior puede resolverse por el método de *separación de variables*, el cual supone que la función de onda, $\psi(x, y, z)$, puede expresarse como el producto de tres funciones, cada una de las cuales depende únicamente de una de las variables espaciales, esto es,

$$\psi(x, y, z) = X(x)Y(y)Z(z) .$$

Al introducir esta solución en (2.27), obtenemos el siguiente conjunto de ecuaciones:

$$\frac{d^2 X}{dx^2} + k_x^2 X = 0 \quad , \quad X(x) = 0 \quad \text{para} \quad 0 \geq x \geq a \quad (2.28a)$$

$$\frac{d^2 Y}{dy^2} + k_y^2 Y = 0 \quad , \quad Y(y) = 0 \quad \text{para} \quad 0 \geq y \geq b \quad (2.28b)$$

$$\frac{d^2 Z}{dz^2} + k_z^2 Z = 0 \quad , \quad Z(z) = 0 \quad \text{para} \quad 0 \geq z \geq c \quad (2.28c)$$

donde

$$k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} . \quad (2.29)$$

Nótese que cada una de las ecuaciones (2.28a)–(2.28c) es equivalente a la ecuación (2.19) ya resuelta para el caso del pozo monodimensional. Consecuentemente, la solución del presente vendrá dada por

$$k_x = n_x \frac{\pi}{a} , \quad k_y = n_y \frac{\pi}{b} , \quad k_z = n_z \frac{\pi}{c} , \quad (2.30)$$

estando la función de onda de la partícula (esto es, cada estado del sistema) determinada por *tres* números cuánticos, (n_x, n_y, n_z) [$n_\alpha = 1, 2, 3, \dots$] según

$$\psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{abc}} \sin\left(\frac{n_x \pi}{a} x\right) \sin\left(\frac{n_y \pi}{b} y\right) \sin\left(\frac{n_z \pi}{c} z\right) . \quad (2.31)$$

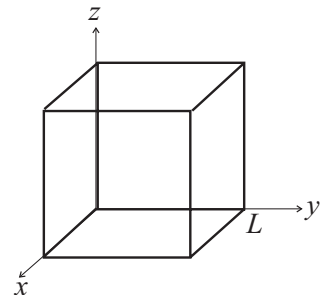
Teniendo en cuenta (2.30) y (2.29), los valores de energía de cada estado vienen finalmente dados por

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2} \right) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} . \quad (2.32)$$

Función densidad de estados

Una situación práctica interesante se presenta cuando el pozo de potencial es *cúbico*, es decir, $a = b = c \equiv L$. En este caso, cada estado del sistema viene determinado de nuevo por la terna de números cuánticos (n_x, n_y, n_z) , pudiéndose escribir la energía de cada estado como

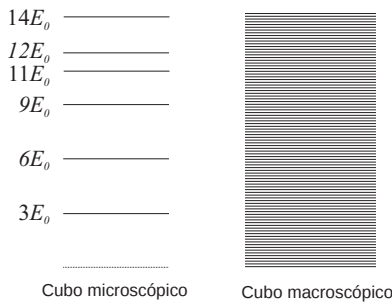
$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) = (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) E_0 , \quad (2.33)$$



donde

$$E_0 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} . \quad (2.34)$$

Según muestra la expresión (2.33), los valores de la energía muestran *degeneración*, esto es, existen distintos estados (o, lo que es lo mismo, estados caracterizados por ternas distintas de números cuánticos) que presentan el mismo valor de la energía. Para ver esto en más detalle considérese la siguiente tabla:



Energía	Terna de números cuánticos	Degeneración (g)
$3E_0$	(1, 1, 1)	1
$6E_0$	(2, 1, 1), (1, 2, 1), (1, 1, 2)	3
$9E_0$	(2, 2, 1), (2, 1, 2), (1, 2, 2)	3
$11E_0$	(3, 1, 1), (1, 3, 1), (1, 1, 3)	3
$12E_0$	(2, 2, 2)	1
$14E_0$	(1, 2, 3), (1, 3, 2), (2, 1, 3), (2, 3, 1), (3, 1, 2), (3, 2, 1)	6

donde podemos ver que, por ejemplo, seis estados distintos presentan idéntico valor de energía, $E = 14E_0$.

Pozo de potencial de dimensiones macroscópicas

En el caso de que la partícula (por ejemplo, un electrón) esté en el interior de un pozo cuyas dimensiones sean *macroscópicas*, por ejemplo: $L \sim 1\text{cm}$, la mínima diferencia energética entre los distintos estados, $\Delta E \equiv E_0$, se hace extremadamente pequeña:

$$\Delta E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \sim \frac{(10^{-34})^2 \cdot 10}{10^{-30} \cdot (10^{-2})^2} \sim 10^{-33} \text{ J} \sim 10^{-14} \text{ eV} .$$

Este valor tan diminuto para ΔE hace que, a efectos prácticos, podamos despreciar el hecho de que el espectro de energía esté cuantizado y consideremos a la energía, E , como una variable *continua* más bien que discreta. En consecuencia, incluso en un intervalo infinitesimal de energía, dE , existirán muchos estados distintos. En esta situación es conveniente introducir el concepto de función **densidad de estados**, $g(E)$. Esta función mide la “densidad energética de estados”, es decir,

$$g(E)dE = \left\{ \begin{array}{l} \text{número de estados cuyos valores} \\ \text{de energía están comprendidos en el} \\ \text{intervalo entre } E \text{ y } E + dE \end{array} \right\} .$$

Una manera directa de obtener la función densidad de estados requiere el cálculo, en primer lugar, del número de estados, $N(E)$, cuyas energías son menores o iguales que E :

$$N(E) = \text{Número de estados cuya energía } \leq E .$$

Para llevar a cabo el cálculo anterior, considérese la siguiente construcción en la que cada punto, de coordenadas (n_x, n_y, n_z) , representa un estado cuántico distinto (nótese que $n_\alpha \geq 1$, por lo que los puntos sólo aparecen en el octante mostrado). La distancia, R , desde el origen a cada uno de los puntos viene dada por

$$R^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2,$$

o equivalentemente, teniendo en cuenta la expresión de la energía dada por (2.33),

$$R = \left(\frac{E}{E_0} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (2.35)$$

El número de estados con energías menores o iguales que E puede, por tanto, calcularse muy aproximadamente como el número de puntos cuya distancia al origen es menor que $R(E)$, esto es

$$N(E) = \frac{\frac{1}{8} \times \text{Volumen esfera de radio } R(E) = \left(\frac{E}{E_0} \right)^{\frac{1}{2}}}{\text{Volumen de cada cubito elemental} \equiv 1},$$

por lo que

$$N(E) = \frac{1}{8} \times \frac{4}{3} \pi [R(E)]^3 = \frac{\pi E^{3/2}}{6 E_0^{3/2}}. \quad (2.36)$$

Una vez calculado $N(E)$, el número de estados comprendido entre E y $E + dE$ vendrá dado simplemente por $dN(E) = g(E)dE$, esto es,

$$dN = \frac{\pi}{4E_0^{3/2}} E^{1/2} dE, \quad (2.37)$$

de donde podemos deducir que la función densidad de estados, $g(E)$, será

$$g(E) = CE^{1/2}, \quad (2.38)$$

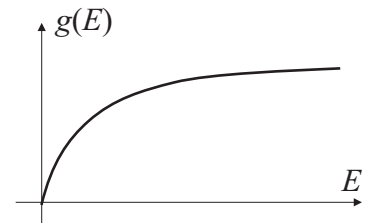
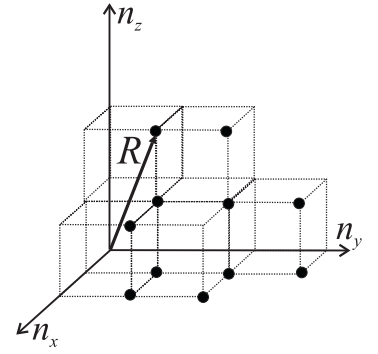
donde la constante C suele expresarse como

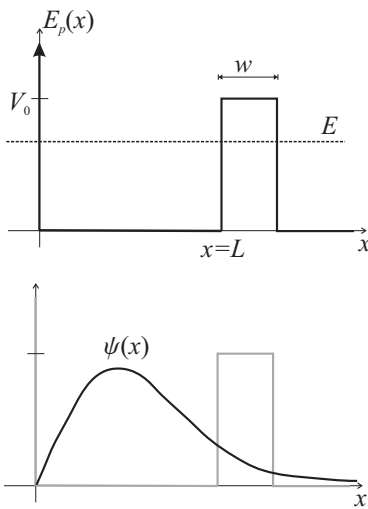
$$C = \frac{\pi}{4E_0^{3/2}} = \frac{4\pi V(2m^3)^{1/2}}{h^3} = \frac{V(2m)^{3/2}}{4h^3\pi^2}, \quad (2.39)$$

siendo $V = L^3$ el volumen de la región macroscópica donde se encuentra la partícula. Este importante resultado será ampliamente usado en posteriores temas cuando se estudien electrones *libres* en sólidos.

2.3. Efecto túnel

En el apartado 2.2.2 se obtuvo la función de onda para el caso de un pozo de potencial monodimensional de paredes infinitas. En ese caso, la función de onda fue fácil de obtener debido a que las condiciones de contorno forzaban que $\psi(x)$ fuese nula en los extremos del pozo.





Una pequeña modificación de este problema ilustrará un fenómeno cuántico que es de fundamental importancia en muchos dispositivos de estado sólido: el **efecto túnel** cuántico de un electrón a través de una *barrera* de potencial de anchura y altura finita.

Considérese una partícula sometida a la barrera de potencial de anchura w y altura V_0 mostrada en la figura adjunta y cuya energía total sea menor que la altura de la barrera ($E < V_0$). En el presente caso, la condición de contorno no impone ahora que la función de onda tenga que anularse en el borde de la barrera ($x = L$), por lo que $\psi(x = L)$ tomará un valor distinto de cero. Teniendo en cuenta la propiedad de continuidad para la función de onda y su derivada, podemos deducir que $\psi(x)$ tampoco será nula en el interior de la barrera ni a su derecha. Dado que $\psi(x)$ no se anula para $x > L + W$ (y, por tanto, tampoco lo hace $|\psi(x)|^2$), existirá cierta probabilidad de encontrar al electrón más allá de la barrera. Aunque la presencia del electrón en estos lugares parece indicar que el electrón haya “saltado” la barrera de potencial (no podría hacerlo dado que tiene una energía insuficiente para ello), debemos interpretar este resultado considerando más bien que la partícula ha “atravesado” la barrera de algún modo. Este efecto, que podría visualizarse como un “tunelamiento” a través de la barrera, es un fenómeno puramente cuántico que no tiene ninguna analogía en la Física Clásica, donde obviamente una partícula no puede “saltar” una barrera de potencial a no ser que tenga suficiente energía para ello (E debe ser mayor que V_0). Debe notarse que la amplitud de la función de onda más allá de la barrera decrecerá a medida que la anchura y la altura de la barrera aumentan, de modo que para una barrera de potencial infinitamente alta se recuperarían los resultados del pozo infinito.

2.4. Átomos hidrogenoides

2.4.1. Números cuánticos

Tal como ya se ha descrito, una de las características más importantes de la ecuación de Schrödinger es que es consistente con muchos de los postulados de la Física Cuántica, haciéndose éstos explícitos cuando se resuelve matemáticamente la ecuación. Esto ha sido observado, por ejemplo, en la cuantización de los niveles energéticos para la partícula en un pozo de potencial. En este sentido, podremos esperar que la aplicación de la ecuación de Schrödinger a la resolución del átomo de Hidrógeno reproduzca algunos de los postulados de Bohr, además de proporcionar información adicional que permita explicar algunos de los resultados que el modelo de Bohr no podía.

Para resolver la ecuación de Schrödinger para un átomo hidrogenoide (esto es, aquél compuesto de un núcleo en reposo con una carga positiva Ze y un electrón de carga $-e$ orbitando en torno a dicho

núcleo) debemos obtener, en primer lugar, la energía potencial del sistema. Dado que el sistema que estamos estudiando es un conjunto de partículas cargadas, la energía potencial del sistema debe dar cuenta de la atracción electrostática existente entre el núcleo y el electrón (es fácil comprobar que la interacción gravitatoria es totalmente despreciable respecto a la electrostática), por lo que encontramos que

$$E_p(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} . \quad (2.40)$$

Dado que el potencial, E_p , no depende explícitamente del tiempo, la ecuación que habría que resolver para la parte espacial de la función de onda, $\psi(\mathbf{r})$ sería

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} \psi = E\psi . \quad (2.41)$$

Afortunadamente esta ecuación puede resolverse de forma analítica (sin necesidad de métodos numéricos), aunque es una tarea de cierta complejidad matemática que no será expuesta aquí en detalle. Para resolver (2.41) se aplicaría de nuevo el método de separación de variables, tal y como ya se usó en la resolución de (2.26), aunque ahora debido a la simetría *esférica* del potencial, la separación de variables se realiza en coordenadas esféricas, esto es,

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi(r, \phi, \theta) = R(r)\Phi(\phi)\Theta(\theta) .$$

Tras laboriosos cálculos matemáticos se obtiene que la función de onda depende de tres números cuánticos (al igual que ocurría con la partícula en el pozo tridimensional), que en este caso se denominan: n, l y m_l . En consecuencia, el estado del sistema, determinado por

$$\psi_{n,l,m_l}(r, \phi, \theta) ,$$

estará descrito por esta terna de números cuánticos. La resolución de (2.41) nos proporcionaría además el siguiente significado para estos tres números cuánticos:

■ **Número cuántico principal n ,**

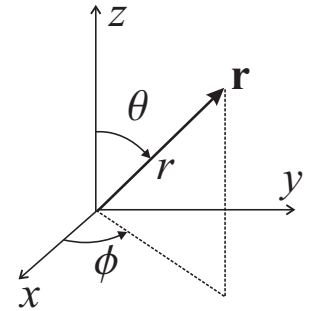
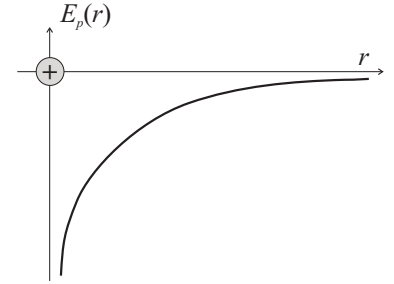
Este número cuántico puede tomar los valores naturales

$$n = 1, 2, 3, \dots . \quad (2.42)$$

- Está relacionado con $R(r)$, la parte radial de la función de onda.
- En principio, el valor de la energía del estado depende únicamente de este número cuántico. El resultado que se obtiene es

$$E_n = -\frac{13,6}{n^2} Z^2 \text{ (eV)} . \quad (2.43)$$

Este resultado es idéntico al obtenido por el modelo de Bohr, aunque ahora se ha obtenido como un resultado matemático fruto de la resolución de la ecuación de Schrödinger.



- El valor más probable del radio en el que se puede localizar al electrón aumenta al incrementarse n . Esto sugiere la existencia de *capas* en el átomo.

■ **Número cuántico orbital l ,**

Los valores que puede tomar este número cuántico son

$$l = 0, 1, 2, \dots, n - 1. \quad (2.44)$$

- Está relacionado con la parte azimutal de la función de onda, $\Theta(\theta)$.
- Determina el valor del *módulo* del momento angular orbital (L), esto es, de la resolución de (2.41) se obtiene que

$$L = \sqrt{l(l+1)} \hbar. \quad (2.45)$$

Es interesante notar que si $l \gg 1$, el valor de L coincide con el proporcionado por el modelo de Bohr ($L = n\hbar$) — ver expresión (1.15)—, lo que nos dice que el resultado del modelo de Bohr era una aproximación de L para valores altos del número cuántico l .

- En función del valor número de l se usa la siguiente denominación:

l	0	1	2	3	...
	s	p	d	f	...

■ **Número cuántico magnético, m_l**

Puede tomar los siguientes valores enteros

$$m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l. \quad (2.46)$$

- Está relacionado con la parte angular $\Phi(\phi)$ de la función de onda.
- Determina la *orientación* del momento angular $\mathbf{L}$ cuando se introduce una dirección privilegiada (por ejemplo, mediante un campo magnético $\mathbf{B}$). Si esta dirección privilegiada está dirigida, por ejemplo, según el eje z , encontramos que

$$L_z = m_l \hbar. \quad (2.47)$$

- En presencia de un campo magnético, la aparición de este número cuántico da lugar al **efecto Zeeman**. Este efecto consiste en que cada raya espectral en ausencia de campo magnético se desdobra en tres si $\mathbf{B} \neq 0$. Un análisis semi-clásico muestra que la energía del sistema en presencia de un campo magnético no sólo depende del número cuántico principal n sino que también aparece una energía potencial, $E_{p,m}$, de origen magnético que viene dada por

$$E_{p,m} = m_l \mu_B B, \quad (2.48)$$

Módulo momento angular orbital

donde $\mu_B = e\hbar/2m$ es una constante que se conoce como *magnetón de Bohr* y su valor es

$$\mu_B = 9,27 \times 10^{-24} \text{ Am}.$$

La energía del estado descrito por la terna de números cuánticos (n, l, m_l) será por tanto

$$E = E_n + m_l \mu_B B. \quad (2.49)$$

Esta última expresión indica que, en ausencia de campo magnético ($\mathbf{B} = 0$), un estado con número cuántico l presenta una degeneración en la energía de $2l + 1$; es decir, existen $2l + 1$ estados (debido a los distintos valores de m_l) con el mismo valor de energía. Así se tiene que

estado l	s	p	d	f	$\dots$
degeneración	1	3	5	7	$\dots$

Cada uno de los estados degenerados anteriores se desdoblará en $2l + 1$ estados en presencia de un campo magnético. La aparición de estos nuevos valores de la energía hace que aparezcan más rayas espectrales, de modo que cuando se tienen en cuenta las *reglas de selección* (reglas que nos dicen que las únicas transiciones entre estados permitidas son aquellas que verifican $\Delta l = 1$, $\Delta m_l = 0, \pm 1$), cada una de las rayas espectrales originales (cuando $B = 0$) se desdobla en tres.

EJEMPLO 2.2 Obtenga el valor del campo magnético aplicado a un gas de hidrógeno si existe una variación mínima de $120 \text{ \AA}$ en la raya espectral correspondiente a la transición $3 \rightarrow 2$.

La fórmula de Rydberg-Ritz, expresión (1.1), nos dice que la longitud de onda correspondiente a una transición con $n = 3$ y $m = 2$ es

$$\frac{1}{\lambda} = 1,0968 \times 10^7 \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2} \right) \implies \lambda = 6562,9 \text{ \AA}.$$

Si tenemos en cuenta que la energía debida a la emisión de fotones de longitud de onda λ es

$$E = \frac{hc}{\lambda},$$

la variación en la longitud de onda, $\Delta\lambda$, con respecto a la energía vendrá dada por

$$\Delta\lambda = \left| \frac{d\lambda}{dE} \right| \Delta E = \frac{\lambda^2}{hc} \Delta E,$$

de donde deducimos que

$$\Delta E = \frac{hc}{\lambda^2} \Delta\lambda = \frac{6,6 \times 10^{-34} \cdot 3 \times 10^8}{(6,57 \times 10^{-7})^2} \times 1,2 \times 10^{-8} = 5,5 \times 10^{-21} \text{ J}.$$

Considerando ahora, según (2.49), que la variación *mínima* en la energía debido a la presencia de un campo magnético de módulo B viene dada por

$$\Delta E = \mu_B B ,$$

al igualar las dos expresiones anteriores obtenemos que

$$B = \frac{\Delta E}{\mu_B} = \frac{5,5 \times 10^{-21}}{9,27 \times 10^{-24}} = 593,8 \text{ T} .$$

2.4.2. Spin del electrón

Aunque la aplicación de la ecuación de Schrödinger al átomo de hidrógeno justificó muchos de los fenómenos asociados a dicho átomo, todavía existían algunos fenómenos que no pudieron ser explicados satisfactoriamente. Uno de estos fenómenos fue la *estructura fina del hidrógeno*, que consiste en que cada una de las rayas espectrales de este elemento (en ausencia de campo magnético) en realidad estaba compuesta de dos rayas muy próximas. Esto indicaba que la energía de los diferentes estados del átomo no sólo dependían del número cuántico principal sino también de otro número cuántico no descrito por la ecuación de Schrödinger. Para solventar este problema se postuló la existencia de un momento angular *intrínseco*, $\mathbf{S}$, llamado momento de *spin*. Esta nueva magnitud es una propiedad puramente cuántica, en el sentido de que no existe ninguna magnitud clásica análoga³. Similarmente a lo que sucedía con el momento angular orbital, $\mathbf{L}$, el módulo y la orientación del momento angular de *spin*, $\mathbf{S}$, podían relacionarse con dos nuevos números cuánticos s y m_s según

$$S = \sqrt{s(s+1)} \hbar \quad ; \quad s = 1/2 \quad (2.50)$$

$$S_z = m_s \hbar \quad ; \quad m_s = \pm 1/2 . \quad (2.51)$$

Dado que el número cuántico s sólo toma un único valor, no tiene sentido considerarlo como un número cuántico adicional y por ello el cuarto número cuántico que define el estado del átomo de hidrógeno será el m_s . El estado queda, por tanto, completamente determinado por la cuaterna de números cuánticos: n, l, m_l, m_s .

Un estudio más profundo de este tema nos mostraría que el *spin* del electrón juega un papel fundamental en la explicación de algunos fenómenos tan destacados como

- Las fuerzas que intervienen en los enlaces covalente y metálico,
- Las propiedades magnéticas de los distintos materiales. Este hecho puede justificarse debido a que, asociado al momento angular de *spin* ($\mathbf{S}$), existe un momento dipolar magnético de *spin*

³La introducción del *spin* del electrón sólo pudo ser justificado posteriormente por Dirac en el marco de la teoría cuántica relativista

dado por

$$\mathbf{p}_{m,s} = -\frac{e}{m} \mathbf{S}, \quad (2.52)$$

que es, por ejemplo, responsable del origen del campo magnético *natural* que presentan ciertos materiales (imanes, ferritas, etc...).

2.5. Tabla periódica

La teoría de Schrödinger más el postulado sobre el *spin* proporciona igualmente una justificación teórica a la disposición de los distintos elementos en la Tabla Periódica. Esta justificación proviene del estudio de los **átomos multielectrónicos**, y dado que este estudio excede los objetivos del presente tema, aquí optaremos por llevar a cabo un tratamiento eminentemente cualitativo que hace uso de aproximaciones muy simplificadoras. Una de las aproximaciones más fructíferas es la descripción de la función de onda de un átomo multielectrónico mediante funciones de onda de partículas aisladas; esto es, despreciando la interacción mutua entre los electrones. Estas funciones de onda son muy semejantes a las ya descritas para el átomo de hidrógeno y estarán por tanto caracterizadas por los cuatro números cuánticos n, l, m_l y m_s . A diferencia del caso del hidrógeno (en el que la energía del electrón sólo dependía de n), la energía del electrón en el átomo multielectrónico vendrá ahora determinada por los números cuánticos n y l . La especificación de estos dos números cuánticos para cada electrón del átomo se denomina **configuración electrónica**. La nomenclatura de esta configuración no hace uso del valor del número cuántico l sino de su letra asociada (ver Apartado 2.4.1). En este sentido los estados determinados por n y l serán

n	1	2		3			4				5		
l	0	0	1	0	1	2	0	1	2	3	0	1	...
	1s	2s	2p	3s	3p	4d	4s	4p	4d	4f	5s	5p	...

Uno de los hechos que regirá la configuración de los electrones en los distintos estados es el **principio de exclusión de Pauli** que puede enunciarse como

Principio de exclusión de Pauli

dos electrones en un sistema (átomo, sólido,...) no pueden estar en el mismo estado cuántico.

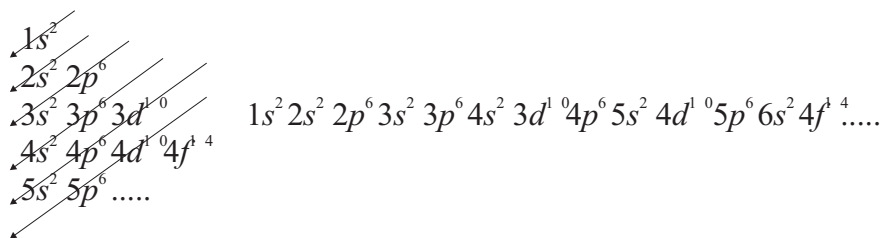
En el caso del átomo multielectrónico, esto implica que no pueden poseer la misma serie de números cuánticos. En consecuencia, teniendo en cuenta la degeneración de los estados con el mismo número cuántico l (ya vista en el Apartado 2.4.1) y la existencia de otra degeneración simultánea debida al *spin*, cada estado caracterizado por l puede “albergar” el siguiente número de electrones

estado l	s	p	d	f	...
número máximo de electrones	2	6	10	14	...

Otras consideraciones relevantes que surgen del análisis de las funciones de onda del átomo multielectrónico son las siguientes:

- La energía del electrón aumenta al incrementarse n —dado que aumenta la distancia media del electrón al núcleo y éste ejerce menos atracción;
- Para un n dado, los electrones con menor módulo del momento angular tienen una probabilidad mayor de estar en regiones cercanas al núcleo. Esto afecta a la carga efectiva del núcleo que “siente” el electrón según el grado de apantallamiento de la carga nuclear por los demás electrones y, por consiguiente, explica la dependencia de la energía con l y que para un valor dado de n , la energía crezca al aumentar el valor de l ;
- Si se tiene un electrón en cada uno de los m_l estados asociados con un l dado, la distribución de la carga espacial tendrá simetría esférica.

Todas las consideraciones anteriores sirven para justificar la dependencia *periódica* de las propiedades físicas y químicas de los distintos elementos con respecto a su número atómico, conduciendo así a la clasificación de los elementos en grupos y columnas que aparece en la Tabla Periódica. Dado que las propiedades de un elemento dependen fundamentalmente de su configuración electrónica, la Tabla Periódica no es más que una clasificación de los elementos en función de esta configuración. Ahora bien, debido a la dependencia de la energía de los estados tanto con n como con l , el orden *energético* con el que se ordenan los distintos estados sigue la siguiente ley:



El que se llene antes el nivel $4s$ que el $3d$ reside en el hecho anteriormente señalado de que niveles con un bajo valor de l tienden a tener menos energía y pueden así compensar el incremento producido por el aumento del número cuántico n .

Dado que la interacción entre distintos átomos se llevará a cabo fundamentalmente mediante la interacción de los electrones de sus capas más externas, la explicación de las propiedades de los elementos

distribuidos en los distintos grupos de la Tabla Periódica puede relacionarse con la configuración de sus electrones en las últimas capas. Por ejemplo, el comportamiento de las fuerzas interatómicas que condicionarán la formación de moléculas y cristales estará determinado por la estructura de las capas electrónicas más externas de los átomos que interaccionan. Un parámetro importante en este sentido es la **electronegatividad**, que mide la capacidad de un átomo para capturar o ceder un electrón de valencia (electrón de su última capa). Puede así explicarse, por ejemplo, el comportamiento *inerte* de los gases nobles en función de su escasa tendencia a captar o ceder electrones ya que poseen su capa más externa p completamente llena. Este hecho, que implica la ausencia de momento dipolar magnético y eléctrico en estos elementos (dada su distribución de carga esférica y la compensación mutua de los *spines* electrónicos) junto con la importante diferencia energética que existe entre la capa p llena y la siguiente s , da lugar a que se necesite mucha energía para romper la muy estable simetría esférica de carga —usualmente esta energía no está disponible a las temperaturas ordinarias. Explicaciones de esta misma índole justificarán también el comportamiento de los átomos de los restantes grupos.

2.6. Problemas propuestos

2.1: El principio de superposición para las soluciones de la ecuación de Schrödinger establece que si Φ_1 y Φ_2 son soluciones de la ecuación, $\Phi = A\Phi_1 + B\Phi_2$ también es una solución, donde A y B son constantes arbitrarias. ¿Es válido este principio tanto para la ecuación independiente del tiempo como para la dependiente?. Razonar la respuesta.

Sol. Sí.

2.2: Una partícula se mueve en línea recta bajo la acción de un campo eléctrico uniforme $\mathcal{E}$ de modo que su energía potencial es $E_p = -\mathcal{E}x$. Escriba la ecuación de Schrödinger para este movimiento y discuta si está cuantizada la energía en este caso.

2.3: Un electrón excitado en uno de los estados de un pozo de potencial de paredes infinitas y anchura a puede emitir fotones cuando decae a niveles energéticos inferiores. Suponiendo que sólo las transiciones en las que $\Delta n = \pm 1$ están permitidas, hallar las frecuencias de las radiaciones emitidas en estas transiciones.

Sol. $\nu_n = (2n + 1)h / (8ma^2)$.

2.4: La función de onda $\Phi(x)$ de un electrón para el cuarto estado excitado, en el interior de un pozo de potencial infinito, es: $\Phi(x) = \sqrt{2/a} \sin(4\pi x/a)$. ¿Cuál es la probabilidad de encontrar al electrón en la región $0 < x < a/4$?

Sol. 25 %.

2.5: La ecuación diferencial de Schrödinger para la variable ϕ en el átomo de Hidrógeno es de la forma:

$$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} + m_l^2\Phi = 0,$$

siendo ésta similar a la de una partícula en un pozo de potencial de paredes infinitas. Suponiendo que una solución es de la forma: $\Phi = e^{\alpha\phi}$ (a) demostrar que Φ es solución de la ecuación y que $\alpha = im_l$, siendo i la unidad imaginaria. (b) Debido a que la

función de onda, Φ , debe ser unívoca, esto es, $\Phi(\phi) = \Phi(\phi + 2\pi)$, demostrar que los posibles valores para m_l son: $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

2.6: Si tenemos $2N$ electrones en un pozo de potencial monodimensional de paredes infinitas y anchura L , obtenga el valor de la energía del último estado lleno (a $T = 0$ K este nivel de energía es conocido como energía de Fermi, E_F). Tenga en cuenta que el principio de exclusión prohíbe la existencia de más de dos electrones en el mismo estado cuántico.

Sol. $E_F = \frac{h^2}{8m_e} \left(\frac{N}{L} \right)^2$

2.7: Calcular la energía más baja posible, E_1 , de un electrón confinado en el interior de una región de 10^{-11} m (aproximadamente el orden de magnitud de un núcleo atómico). Comparar esta energía con la energía potencial gravitatoria y la potencial electrostática de un electrón y un protón a la misma distancia. Basándose en lo anterior discuta la posibilidad de que exista un electrón en el interior de un núcleo.

Sol. $E_1 = 3,8 \times 10^3$ MeV; $E_{\text{grav}} = 6,34 \times 10^{-17}$ eV; $E_{\text{elst}} = 1,44 \times 10^4$ MeV

2.8: Demostrar que los niveles de energía y funciones de onda de una partícula que se mueve en el plano XY dentro de una caja de potencial bidimensional de lados a y b son $E = (\pi^2 \hbar^2 / 2m)(n_1^2 / a^2 + n_2^2 / b^2)$ y $\psi = C \sin(n_1 \pi x / a) \sin(n_2 \pi y / b)$. Discutir la degeneración de los niveles cuando $a = b$. Hallar la constante de normalización C .

2.9: Si el problema anterior los lados de la caja son muy grandes pero iguales, demuestre que el número de estados cuánticos con energías comprendidas entre E y $E + dE$ viene dado por $(ma^2 / 2\pi \hbar^2) dE$.

2.10: Para un átomo de Hidrógeno en el estado $l = 3$, ¿Cuáles son los valores permitidos de las componentes z del momento angular y del momento magnético?

Sol. $0, \pm \hbar, \pm 2\hbar, \pm 3\hbar; 0, \pm \frac{e\hbar}{2m}, \pm \frac{e\hbar}{m}, \pm \frac{3e\hbar}{2m}$.

2.11: Dibujar un diagrama de niveles de energía para los estados $4f$ y $3d$ del hidrógeno en presencia de un campo magnético. Mostrar que en la transición $4f \rightarrow 3d$ el número de líneas espectrales es tres. Si el campo magnético es de $0,5$ T, ¿serán observables las anteriores líneas en un espectrómetro de resolución 10^{-11} m?

Sol. Sí ($\Delta\lambda = 8,2 \times 10^{-11}$ m).

2.12: ¿Cuál es el campo magnético B necesario para observar el efecto Zeemann si un espectrómetro puede separar líneas de hasta $0,5\text{\AA}$ en $5000\text{\AA}$?

Sol. $B \approx 4,28$ T.

2.13: Determinar los momentos magnéticos posibles en un nivel energético $n = 3$. ¿Qué predice la teoría de Bohr?

Sol. $0, 1,31 \times 10^{-13}$ J/T, $2,27 \times 10^{-13}$ J/T; Bohr: $2,78 \times 10^{-13}$ J/T.

2.14: La configuración electrónica del azufre, $Z = 16$, es $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$. Escribir un conjunto completo de números cuánticos para los cuatro electrones en el subnivel $3p$.

2.15: Escribir la configuración electrónica del aluminio (Al, $Z = 13$), calcio (Ca, $Z = 20$) y bromo (Br, $Z = 35$).

2.16: Clasificar las siguientes configuraciones electrónicas como correspondientes a átomos en estado fundamental, a átomos en estado excitado o en incorrecta. ¿De qué elemento se trata en cada caso? 1) $1s^2 2s$, 2) $1s^2 2s^2 2d$, 3) $1s^2 2s^2 2p^2$, 4) $1s^2 2s^2 2p^4 3s$, 5) $1s^2 2s^4 2p^2$, 6) $1s^2 2s^2 2p^6 3d$

2.17: Escribir los números cuánticos que caracterizan a los electrones desapareados del potasio (K) y del cloro (Cl).

Sol. $(4, 0, 0, 1/2), (3, 1, 1, 1/2)$.

2.18: (a) ¿Cuál es la configuración electrónica del litio (Li , $Z = 3$)?. (b) Suponiendo que el Li es equivalente a un átomo de hidrógeno, calcular la energía de ionización del electrón de valencia $2s$. (c) La energía de ionización determinada experimentalmente para el Li es de 5.39 eV , ¿cuál es la carga efectiva positiva que ve el electrón?. (d) Repetir el cálculo anterior para el potasio (K) que posee un electrón de valencia en el subnivel $4s$, siendo su energía de ionización 4.34 eV .

Sol. K : $Z^{\text{eff}} \simeq 2.26e$.

Capítulo 3

Materia Condensada

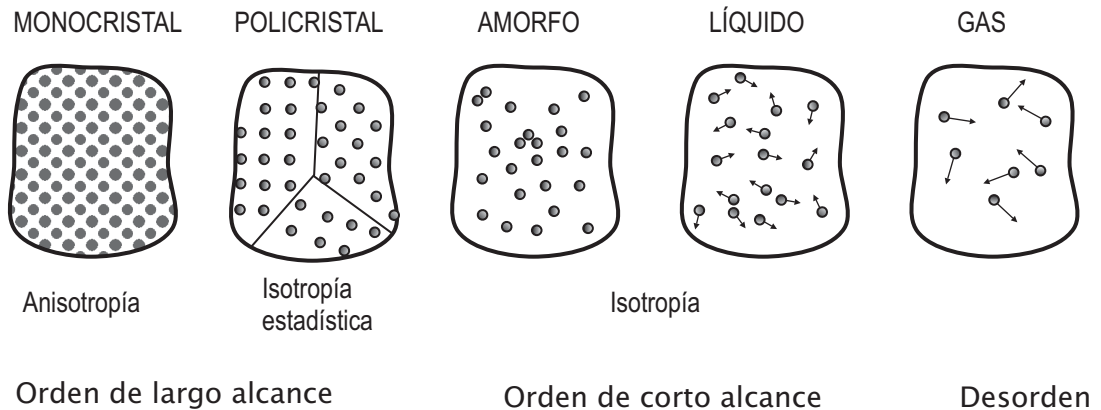
3.1. Estados de Agregación de la Materia

Recordemos que uno de los objetivos finales de la presente asignatura será proporcionar los fundamentos físicos que nos permitan entender el funcionamiento de los dispositivos electrónicos usados en la actual tecnología de los computadores. Dado que este funcionamiento se basa en las propiedades del transporte de carga en metales y semiconductores, los temas anteriores han estado dedicados al estudio de las propiedades cuánticas de las partículas portadoras de carga (fundamentalmente electrones). No obstante, dicho transporte de carga no sólo depende de las propiedades intrínsecas de los electrones sino también de la *disposición* de los átomos en los sólidos. En este sentido, el presente tema mostrará una descripción elemental de la estructura interna de la materia, haciendo especial hincapié en la estructura de los metales y semiconductores.

Una posible clasificación de la materia divide a ésta en materia condensada y materia gaseosa, con las siguientes propiedades generales:

	Materia Condensada	Materia Gaseosa
	Predominio energía potencial de interacción entre sus componentes	Predominio energía cinética de traslación
	Presencia de orden espacial en sus componentes	Distribución caótica de sus componentes
número átomos / m ³	$n \sim 10^{28}$ átomos / m ³	$n \sim 10^{25}$ átomos / m ³
densidad de masa	$\rho \sim 10^3$ kg / m ³	$\rho \sim 1$ kg / m ³
distancia interatómica	$d \sim 3$ Å	$d \sim 200$ Å

Dependiendo del alcance del *orden espacial* de la estructura interna de la materia, podemos distinguir los siguientes estados de agregación de la materia (en rigor, esta clasificación sólo es aplicable a sustancias puras):



■ **Monocrystal:**

Presenta fuertes interacciones entre sus partículas componentes (átomos, grupos de átomos,...), que están casi en reposo (excepto por pequeñas oscilaciones) en un mínimo de energía potencial. Las partículas están dispuestas según un orden espacial bien determinado que define una estructura periódica tridimensional. Ejemplos: mayoría de metales puros, muchos compuestos iónicos, ...

■ **Policristal:**

Está compuesto de pequeñas regiones o granulos, cada una de las cuales con la estructura de un monocrystal de tamaño y orientación irregular.

■ **Amorfos:**

Aunque sus componentes están básicamente en reposo, éstos no presentan una estructura espacial bien definida. Ejemplo: vidrios, plásticos, madera,

■ **Líquidos:**

Sus componentes no presentan fuertes interacciones entre sí por lo que pueden moverse, dando lugar a que estas sustancias adopten la forma de los recipientes que las contienen.

■ **Gases:**

Sus componentes apenas interaccionan entre sí, estando dotados básicamente de energía cinética. Pueden considerarse como un caso extremo de líquidos, presentando menos densidad que éstos.

A continuación estudiaremos elementalmente los dos casos extremos: gases y monocristales.

3.2. Gas

Recordemos que la *ley de los gases ideales* establecía que la presión, P , y el volumen, V , del gas están relacionados con la temperatura absoluta, T , mediante la siguiente expresión:

$$PV = \eta RT, \quad (3.1)$$

siendo η el número de *moles* de partículas (átomos o moléculas) del gas y $R = 8,314 \text{ J/mol-K}$ es la denominada constante de los gases. Conviene recordar que 1 “mol” es simplemente una *cantidad* (al igual que 1 “docena”), en concreto,

$$1 \text{ mol} = 6,022 \times 10^{23},$$

coincidiendo esta cantidad con el llamado **número de Avogadro**, $\mathcal{N}_A$, que puede definirse como el número de átomos necesarios para preparar una cantidad de un elemento igual a su peso atómico expresado en gramos.

La ley experimental (3.1) puede obtenerse siguiendo una descripción *clásica* (esto es, una descripción basada en las leyes de la física clásica), que considera al

Gas como un colectivo muy numeroso de partículas rígidas e independientes en constante movimiento cuyas únicas interacciones se producen a través de choques elásticos entre ellas y con las paredes del recipiente que las contiene.

(Debe notarse que si las partículas del gas estuviesen uniformemente distribuidas, entonces el movimiento térmico de éstas no da lugar a un movimiento neto; es decir, en un promedio temporal, las partículas no se desplazan.)

A partir de la descripción anterior y usando las leyes de movimiento de Newton, la teoría cinética nos permite establecer que

$$PV = \frac{2}{3} N \langle E_c \rangle, \quad (3.2)$$

donde N es el número total de partículas y $\langle E_c \rangle$ la energía cinética media de las partículas del gas.

Las expresiones (3.1) y (3.2) nos dicen que, para 1 mol de partículas, tenemos que

$$PV = RT \quad \text{y} \quad PV = \frac{2}{3} \mathcal{N}_A \langle E_c \rangle.$$

Igualando ambas expresiones obtenemos que

$$\langle E_c \rangle = \frac{3}{2} \frac{R}{\mathcal{N}_A} T,$$

Energía cinética media de las partículas del gas

o, equivalentemente,

$$\langle E_c \rangle = \frac{3}{2} k_B T, \quad (3.3)$$

siendo

$$k_B = \frac{R}{\mathcal{N}_A} = 1,38 \times 10^{-23} \text{ J/K} = 8,63 \times 10^{-5} \text{ eV/K}, \quad (3.4)$$

la denominada **constante de Boltzmann**. El resultado (3.3) nos dice que la temperatura absoluta de un gas es proporcional a la energía cinética media de traslación de las partículas de dicho gas. En consecuencia, el valor de la temperatura (en grados Kelvin) nos informa sobre el valor de la energía cinética media de las partículas del gas.

EJEMPLO 3.1 Calcule la velocidad media de las moléculas de un gas de N_2 que está a temperatura ambiente ($T \sim 300 \text{ K}$).

Dado que todas las partículas del gas de nitrógeno (moléculas de N_2) son idénticas, podemos escribir que

$$\langle E_c \rangle = \left\langle \frac{1}{2} m v^2 \right\rangle = \frac{1}{2} m \langle v^2 \rangle.$$

Considerando que la velocidad cuadrática media, $\langle v^2 \rangle$, es muy aproximadamente igual al cuadrado de la velocidad media, esto es,

$$\langle v \rangle^2 \simeq \langle v^2 \rangle,$$

encontramos, de acuerdo a la expresión (3.3), que

$$\frac{1}{2} m \langle v \rangle^2 = \frac{3}{2} k_B T,$$

de donde podemos obtener el siguiente valor para la velocidad media:

$$\langle v \rangle = \sqrt{\frac{3 k_B T}{m}} = \sqrt{\frac{3 R T}{\mathcal{M}}}, \quad (3.5)$$

siendo $\mathcal{M} = \mathcal{N}_A m$ el peso molecular del gas (peso de 1 mol de partículas). Es interesante notar que esta velocidad es del mismo orden de magnitud que la velocidad de propagación del sonido en el gas (el aire contiene aproximadamente un 70 % de nitrógeno).

En el presente ejemplo, $\mathcal{M} = 14 \text{ g} = 14 \times 10^{-3} \text{ kg}$, por lo que

$$\langle v \rangle = \sqrt{\frac{3 \cdot 8,314 \cdot 300}{14 \times 10^{-3}}} \approx 731,08 \text{ m/s},$$

que es aproximadamente el doble de la velocidad del sonido en el aire.

La expresión (3.3), que se ha obtenido para el caso particular de un gas ideal, puede generalizarse para cualquier otro tipo de sistemas, en cuyo caso se conoce como **teorema de equipartición de la energía**.

Este teorema establece que la energía media por grado de libertad¹ de las partículas del sistema viene dada por

$$\langle E \rangle|_{\text{grado de libertad}} = \frac{1}{2} k_B T. \quad (3.6)$$

Teorema de equipartición de la energía

Dado que un gas es un *colectivo* muy numeroso de partículas ($n \sim 10^{25} \text{ m}^{-3}$), abordaremos su estudio mediante un análisis *estadístico*, en vez de partir de las características de cada una de las partículas individuales que lo componen. En general, el análisis estadístico requiere el conocimiento de la forma en que las partículas están distribuidas respecto a ciertas magnitudes. En concreto nos interesará conocer la distribución de las partículas con respecto a la energía. Si definimos

- $g(E)$
como la **función densidad de estados**, tal que $g(E)dE$ nos dice el número de estados del sistema cuya energía está comprendida entre E y $E + dE$; y
- $f(E)$
como la **función de distribución**, que mide la probabilidad de ocupación de un estado con energía E ;

entonces, si $dN(E)$ es el número de partículas del sistema con energías comprendidas entre E y $E + dE$, tendremos que

$$dN(E) = g(E)f(E)dE. \quad (3.7)$$

Número de partículas del sistema con energías comprendidas entre E y $E + dE$

La expresión anterior es *válida* para cualquier colectivo de partículas, de manera que las propiedades particulares de cada colectivo se especifican mediante la forma de las funciones $g(E)$ y $f(E)$. Si se conocen estas dos funciones, el valor medio de cualquier magnitud, α , que pueda expresarse como una función de la energía puede evaluarse a partir de

$$\begin{aligned} \langle \alpha \rangle &= \frac{\int \alpha(E) dN(E)}{\int dN(E)} = \frac{\int \alpha(E) g(E) f(E) dE}{\int dN(E)} \\ &= \frac{1}{N} \int \alpha(E) g(E) f(E) dE. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Si las partículas que forman el colectivo se consideran “clásicas” (es decir, podemos abordar su estudio a partir de las leyes de Newton, ignorando las leyes “cuánticas” descritas en los temas anteriores), entonces la función distribución que rige el comportamiento de este colectivo se denomina **función distribución de Maxwell-Boltzmann**

¹Cada variable independiente que es necesario especificar para determinar la energía de una partícula se denomina *grado de libertad*. En el caso de una partícula del gas ideal, dado que hace falta especificar las componentes x, y y z de la velocidad de la partícula, ésta tendría tres grados de libertad.

Función distribución de Maxwell-Boltzmann

y viene dada por

$$f_{\text{MB}}(E) \sim \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right). \quad (3.9)$$

En el caso de que las partículas del sistema sean *cuánticas*, la función distribución a usar es la función distribución de Fermi-Dirac, que será estudiada en el Tema 4.

3.3. Monocrystal

El estudio de este estado de la materia se realizará mediante un modelo simple y *representativo* del sólido, conocido como **cristal ideal**.

El cristal ideal se define como un medio material *discreto* e *infinito* con una ordenación espacial regular y periódica de sus componentes, caracterizado básicamente por su

- homogeneidad,
- simetría de traslación —ciertas traslaciones de vectores $\mathbf{T}$ en el interior del cristal dejan a éste invariante,
- anisotropía.

Una de las características más “ideales” y simplificadoras del modelo anterior lo constituye su carácter *infinito*. A pesar de la aparente irrealidad de esta característica, el cristal ideal es un modelo muy válido para el estudio de aquellas propiedades del cristal en las que los efectos de superficie no sean muy significativos. Dado que las propiedades en las que estaremos interesados (fundamentalmente las relacionadas con el transporte de carga) son propiedades que muy aproximadamente son independientes de la forma de la superficie del material, el cristal ideal será un buen modelo para nuestro propósito.

Un concepto básico subyacente al cristal ideal lo constituye la **red cristalina**, que puede definirse como

Red cristalina es un conjunto infinito y discreto de puntos con una disposición y orientación que aparece exactamente la misma desde cualquier punto del conjunto.

Tal como muestra la Fig. 3.1, la red cristalina es una *estructura puramente geométrica* que se forma mediante la traslación periódica (de periodo $\mathbf{T}$) de una malla o **celdilla elemental**.

Una de las características esenciales de esta red cristalina es que pone de manifiesto la importancia que tiene la *disposición geométrica* de la estructura espacial periódica del cristal con independencia de

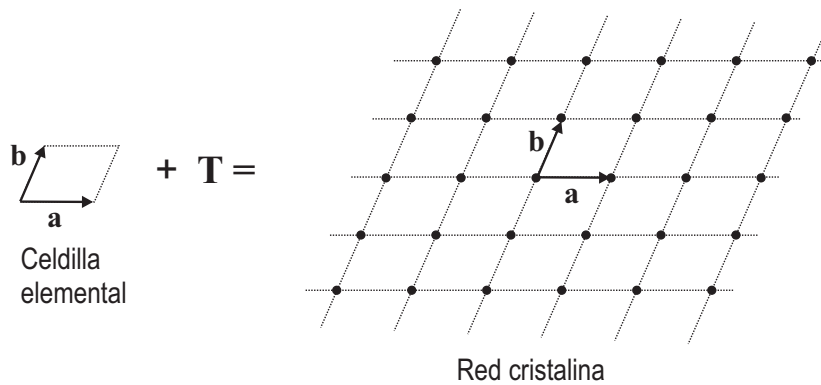


FIGURA 3.1: Formación de una red cristalina bidimensional a partir de la repetición periódica, con periodo $\mathbf{T} = n_1\mathbf{a} + n_2\mathbf{b}$, de la celdilla elemental.

las unidades reales o motivos que la compongan. Este hecho puede observarse en la construcción de la Fig. 3.2, donde se evidencia el hecho de que subyacente a la estructura reticular aparece la composición de la red cristalina con cierto motivo (átomo o grupo de átomos).

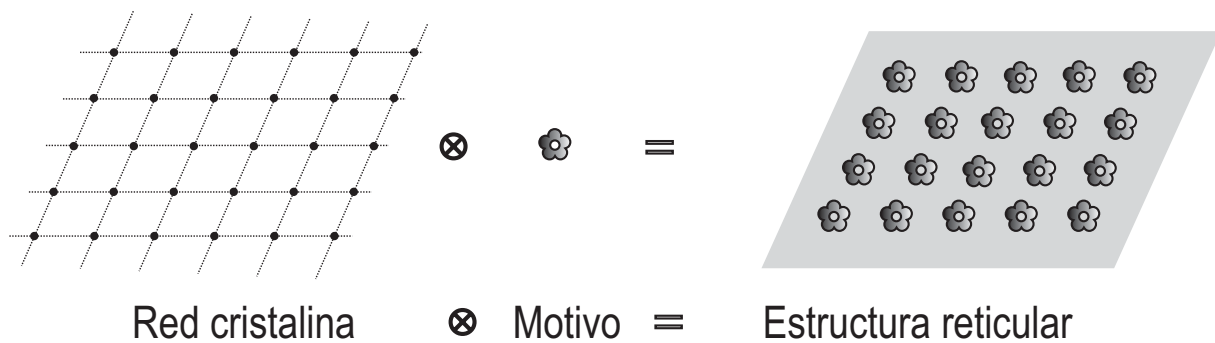


FIGURA 3.2: Estructura reticular vista como producto de la composición de la red cristalina y con cierto motivo.

3.4. Estructuras reticulares

3.4.1. Redes de Bravais

Además de la simetría de traslación presente en la red cristalina, esta red posee otras simetrías (por ejemplo, simetrías puntuales), que son usadas para clasificar los distintos tipos de redes que existen.

El estudio detallado de las distintas simetrías nos permite concluir que todas las posibles redes cristalinas *tridimensionales* pueden clasificarse en 14 tipos distintos de redes, conocidas genéricamente como *redes de Bravais*. Como ejemplo, la Fig. 3.3 muestra las 3 redes que pertenecen al **sistema cúbico**.

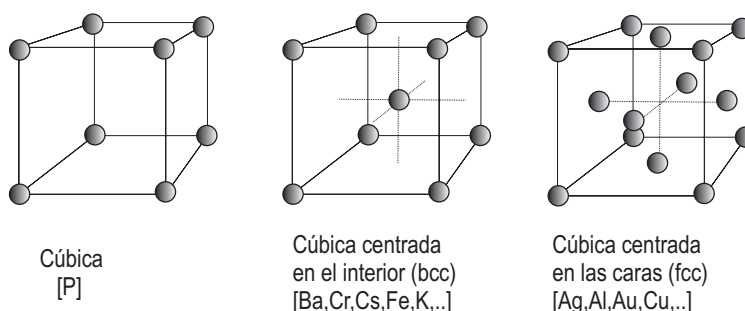
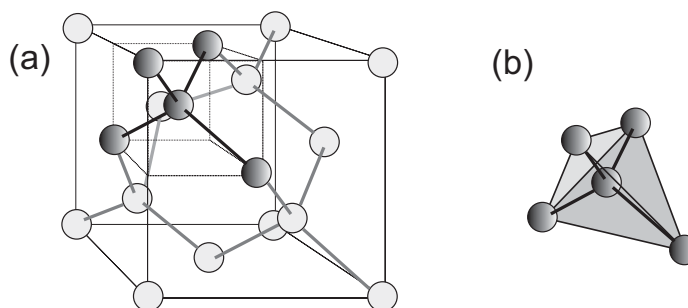


FIGURA 3.3: Redes cristalinas pertenecientes al sistema cúbico.

Una estructura de especial interés práctico (y que no es en sí una red de Bravais) es la denominada **estructura tipo diamante**, que se muestra en la Fig. 3.4(a). Una gran número de las sustancias formadas

FIGURA 3.4: (a) Estructura tipo diamante formada por la interpenetración de dos redes cúbicas centradas en las caras y desplazadas una respecto a la otra $1/4$ a lo largo de la diagonal del cubo. (b) Detalle que muestra la disposición tetraédrica de los átomos de las sustancias que cristalizan en esta red cristalina.

por átomos del grupo IV (C, Si, Ge, ...), o bien aquéllas formadas por átomos del grupo III y V, cristalizan en este tipo de red. Dado que la mayoría de los materiales *semiconductores* están formados por átomos de los grupos anteriores, los semiconductores suelen presentar una estructura tipo diamante. Según muestra la Fig. 3.4(a), la estructura tipo diamante puede visualizarse como dos redes cúbicas fcc interpenetradas y desplazadas una sobre la otra $1/4$ sobre la diagonal del cubo, dando así lugar a una disposición *tetraédrica* (ver Fig. 3.4b) en la que cada átomo puede considerarse localizado en el centro de un tetraedro y formando un enlace con cada uno de sus cuatro vecinos más próximos. Según veremos en temas posteriores, esta disposición tetraédrica determina alguna de las propiedades más características de los semiconductores.

3.4.2. Parámetros de la estructura reticular

Dado que muchos de los compuestos elementales que forman los sólidos (átomos, iones, ...) presentan simetría esférica, la disposición de muchas estructuras reticulares puede visualizarse considerando a

éstas como *empaquetamientos espaciales de esferas rígidas* en forma simétrica y compacta. Algunos de los parámetros más importantes de las redes cristalinas, fruto de la consideración anterior, se describen a continuación.

Número de partículas por celdilla elemental, n_c

El número de partículas por celdilla elemental puede obtenerse como

$$n_c = \frac{n_V}{8} + n_I + \frac{n_F}{2}, \quad (3.10)$$

donde n_V es el número de partículas en los vértices, n_I en el interior y n_F en las caras.

EJEMPLO 3.2 Calcule la densidad del silicio sabiendo que la arista de su celdilla unidad es $a = 5,43 \times 10^{-8}$ cm y que su peso atómico es $A = 28,1$ g.

Dado que el Si cristaliza en una red tipo diamante que está formada por 2 redes fcc interpenetradas, el número de átomos por celdilla elemental será el doble del de una red fcc. Para la red fcc tenemos que $n_V = 8$, $n_I = 0$ y $n_F = 6$, por lo que

$$n_c(\text{fcc}) = \frac{8}{8} + 0 + \frac{6}{2} = 4.$$

Para el silicio tendremos, por tanto, que cada celdilla elemental tiene 8 átomos. Si n es el número de átomos por m^3 , será

$$\begin{aligned} n &= \frac{\text{Número de átomos por celdilla unidad}}{\text{Volumen celdilla unidad}} = \frac{n_c}{a^3} \\ &= \frac{8}{(5,43 \times 10^{-8})^3} \approx 5 \times 10^{22} \text{ átomos/cm}^3. \end{aligned}$$

La densidad, ρ , en g/cm^3 del Si podemos calcularla como

$$\rho = \text{masa de 1 átomo} \times \text{Número de átomos/m}^3 = m_{\text{at}} n,$$

por lo que

$$\rho = \frac{A}{N_A} \frac{n_c}{a^3}, \quad (3.11)$$

que en nuestro caso particular será

$$\rho(\text{Si}) = \frac{28,1}{6,02 \times 10^{23}} \cdot 5 \times 10^{22} \approx 2,3 \text{ g/cm}^3.$$

Índice de coordinación

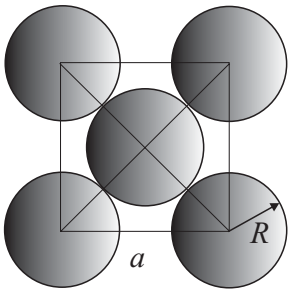
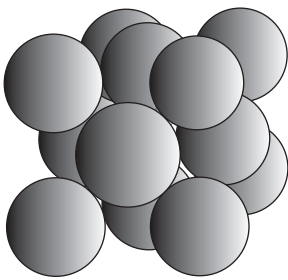
En una celdilla elemental, el índice de coordinación es el número de nodos reticulares adyacentes. Este índice suele determinar el tipo de enlace que cohesiona a la sustancia.

Fracción de empaquetamiento, f_c

Considerando que cada nodo de la celda unidad es el centro de una esfera rígida, de modo que las esferas se distribuyen de la forma más compacta posible, definimos la fracción de empaquetamiento como

$$f_c = \frac{\text{Volumen de las esferas}}{\text{Volumen de la celda}} = \frac{n_c \times V_{\text{esf}}}{a^3}. \quad (3.12)$$

La fracción de empaquetamiento nos proporciona una medida de lo “llena” que está la estructura reticular. De las redes cúbicas, la más compacta es la fcc, mientras que la de menor fracción de empaquetamiento es la cúbica simple.



EJEMPLO 3.3 Calcule la fracción de empaquetamiento para una red fcc.

Para una red fcc, según vimos en el ejemplo anterior, $n_c = 4$. En esta red, según muestra la figura adjunta, el plano de mayor empaquetamiento (es decir, el plano donde las esferas están más juntas) se localiza en una cualquiera de las caras.

En una de las caras debe cumplirse que

$$a^2 + a^2 = (4R)^2 = 16R^2$$

$$2a^2 = 16R^2,$$

de donde

$$R = \frac{1}{\sqrt{8}} a = \frac{\sqrt{2}}{4} a$$

y por tanto

$$f_c(\text{fcc}) = \frac{n_c V_{\text{esf}}}{a^3} = \frac{4 \times \frac{4}{3} \pi \left(\frac{\sqrt{2}}{4} a \right)^3}{a^3}$$

$$= \frac{\sqrt{2}\pi}{6} \approx 0,74$$

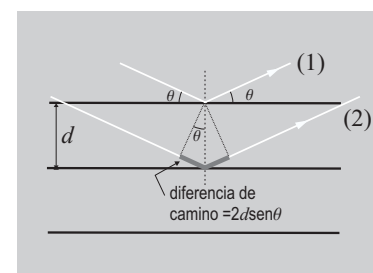
3.5. Observación de las estructuras cristalinas

La estructura interna de los cristales puede determinarse a partir del análisis de la difracción ondulatoria producida cuando fotones, electrones, neutrones, etc... inciden en el cristal. El análisis de la difracción nos informa sobre la configuración interna del cristal debido a que la manera en que las ondas son difractadas viene determinada por la disposición interna de los componentes del cristal. Puesto que las dimensiones implicadas en las estructuras cristalinas (distancias

entre nodos reticulares) son del orden del Å, la configuración de las estructuras reticulares sólo puede “observarse” mediante ondas cuya longitud de onda asociada sea de este mismo orden. En este sentido, al ser la longitud de onda de la radiación visible ($\lambda \sim 5000 \text{ Å}$) mucho mayor que la distancia entre nodos reticulares, esta radiación simplemente da origen a la refracción óptica ordinaria, que claramente no nos proporciona ninguna información sobre la estructura interna del cristal. En el caso de que la radiación incidente esté constituida por rayos X (radiación electromagnética cuya $\lambda \sim \text{Å}$), entonces la difracción producida en el cristal presenta cierta distribución de máximos y mínimos que sí nos informa sobre la estructura interna del cristal.

Una sencilla explicación de la difracción de rayos X en cristales la proporcionó W. L. Bragg, suponiendo que las ondas incidentes se reflejaban “especularmente” en los distintos planos del cristal, de forma que cada plano refleja únicamente una fracción muy pequeña de la radiación total (en un cristal perfecto contribuirían de 10^3 a 10^5 planos atómicos en la formación del haz reflejado). Supuesto, entonces, que cada plano se comporta como un “espejo semitransparente”, aparecerá un máximo de difracción siempre que los haces difractados procedentes de planos de átomos paralelos *interfieran constructivamente*. Esta condición, conocida como **ley de Bragg**, exige que la diferencia de camino entre los haces (1) y (2) de la figura adjunta sea un múltiplo de la longitud de onda, esto es,

$$2d \sin \theta_n = n\lambda .$$



Aunque la ley de Bragg es una consecuencia de la periodicidad de la red, ésta no manifiesta la composición de la base de átomos de la estructura reticular (es decir, si la base es un átomo, un conjunto de átomos,...). Un estudio más riguroso muestra que la composición de la base se refleja en la intensidad relativa de los diversos órdenes de difracción.

3.6. Problemas propuestos

3.1: Determinar el índice de coordinación y la fracción de empaquetamiento para los tres tipos de redes cúbicas.

3.2: Sabiendo que el sodio cristaliza en una red fcc, que su densidad es $0,971 \text{ g/cm}^3$ y su peso atómico 23 g/mol , calcular la longitud de su celda unidad.

Sol. $4,29 \text{ Å}$.

3.3: Calcular la densidad de electrones libres en el cobre si su peso atómico vale $63,5 \text{ g/mol}$ y su densidad es 8950 kg/m^3 , suponiendo que hay un electrón por átomo. Repetir el cálculo para el oro (Au , $A = 197,0$, $\rho = 19,3 \text{ g/cm}^3$, un electrón libre por átomo), y el zinc (Zn , $A = 65,38$, $\rho = 7,1 \text{ g/cm}^3$, dos electrones libres por átomo)

Sol.: $n(\text{Cu}) = 8,48 \times 10^{28} \text{ m}^{-3}$, $n(\text{Zn}) = 1,31 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3}$.

3.4: Calcular la distancia a entre los iones K^+ y Cl^- en el KCl, admitiendo que cada ión ocupa un cubo de arista a . El peso molecular es 74,55 g/mol y la densidad es 1,984 g/cm³.

Sol. $a = 3,15 \text{ \AA}$.

3.5: La dimension de la celda unidad del cobre fcc es de 0.36 nm. Calcular la longitud de onda más grande para los rayos X capaz de producir difracción por los planos cristalinos. ¿Qué planos podrían difractar rayos X de longitud de onda 0.50 nm?.

Capítulo 4

Electrones libres en metales

4.1. Fenomenología

En este tema iniciamos el estudio de la conductividad eléctrica en los sólidos, empezando en primer lugar por el análisis del comportamiento de los electrones libres en los metales. Este estudio tiene un alto interés práctico dado que los metales (por ejemplo, el cobre) forman una parte esencial de los circuitos electrónicos junto con los materiales semiconductores.

Los primeros estudios que se hicieron respecto a la conductividad eléctrica provienen de Ohm(1827). Estudiando metales, Ohm encontró la siguiente relación entre la intensidad de la corriente, I , que recorre el metal y la tensión (o diferencia de potencial), V , entre los extremos de dicho metal:

$$V = IR, \quad (4.1)$$

donde el parámetro R se conoce como **resistencia** del material (sus unidades son ohmios, $1\Omega = 1 \text{ V/A}$). Para un material filiforme de sección constante, este parámetro viene dado por

$$R = \rho \frac{l}{S}, \quad (4.2)$$

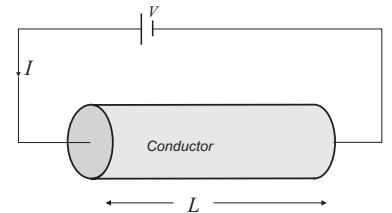
siendo ρ la **resistividad** del material (este parámetro depende de las características internas del materia, siendo sus unidades $\Omega \cdot \text{m}$), l la longitud del conductor y S su sección. La ley de Ohm puede igualmente expresarse como

$$\mathbf{J} = \sigma \mathcal{E}, \quad (4.3)$$

donde $\mathbf{J}$ es el vector la densidad de corriente eléctrica,

$$\sigma = \frac{1}{\rho} \quad (4.4)$$

la **conductividad eléctrica** (sus unidades son $(\Omega \cdot \text{m})^{-1}$) y $\mathcal{E}$ el el vector campo eléctrico aplicado.



En función del número de portadores de carga por unidad de volumen, n , y de la velocidad de arrastre, $\mathbf{v}_a$, de estos portadores, la densidad de corriente se define como

$$\mathbf{J} = nq\mathbf{v}_a . \quad (4.5)$$

Usualmente, la velocidad de arrastre puede relacionarse linealmente con el campo aplicado mediante la siguiente expresión:

$$\mathbf{v}_a = \mu \mathbf{E} , \quad (4.6)$$

siendo μ la **movilidad** de los portadores (sus unidades son $\text{m}^2/\text{V} \cdot \text{s}$). En función de la anterior relación, la conductividad eléctrica puede escribirse como

$$\sigma = qn\mu . \quad (4.7)$$

La expresión anterior nos indica claramente que la conductividad de los materiales depende proporcionalmente del número de portadores de carga y de la movilidad de dichos portadores. En el caso de que existan distintos tipos de portadores, la expresión (4.7) debe generalizarse. En concreto, para el caso de los semiconductores, para los que existen dos tipos de portadores, electrones y huecos, la conductividad puede escribirse como

$$\sigma = q(n\mu_n + p\mu_p) ,$$

donde el subíndice n se refiere a electrones y el subíndice p a huecos. Esta cuestión será analizada con detalle en el Tema 7.

Una posible clasificación de los sólidos en función del valor de la conductividad a temperatura ambiente los divide en: conductores, semiconductores y aislantes.

■ Conductores

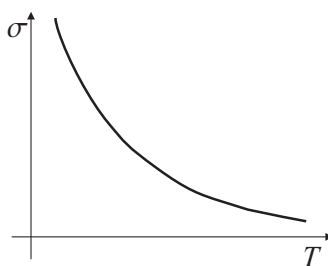
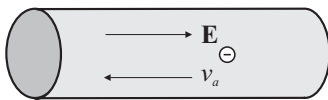
- ▶ $\sigma > 10^4 (\Omega \cdot \text{m})^{-1}$, [Cu, Ag $\sim 10^7 (\Omega \cdot \text{m})^{-1}$]
- ▶ $\frac{d\sigma}{dT} < 0$, la conductividad disminuye con la temperatura. En concreto se encuentra que

$$\sigma = \frac{\sigma_0}{1 + \alpha(T - T_0)} \quad (4.8)$$

- ▶ σ decrece con las imperfecciones y/o impurezas de la red.
- ▶ $n \sim 10^{28} \text{m}^{-3}$. La concentración de electrones libres apenas varía con la temperatura.

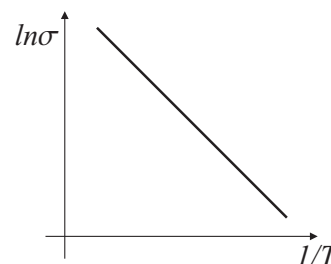
■ Semiconductores

- ▶ $10^{-8} \leq \sigma (\Omega \cdot \text{m})^{-1} \leq 10^4$,
[Si $\sim 4 \times 10^4 (\Omega \cdot \text{m})^{-1}$, Ge $\sim 4 \times 10^4 (\Omega \cdot \text{m})^{-1}$]



- $\frac{d\sigma}{dT} > 0$, la conductividad aumenta al aumentar la temperatura. Experimentalmente se encuentra que la dependencia de la conductividad con la temperatura es del tipo

$$\sigma = \sigma_0 e^{-\alpha/T} \quad (4.9)$$



- σ crece con las impurezas de la red.
- $n \sim 10^{17} \text{ m}^{-3}$. La concentración de electrones libres varía enormemente (de hecho de forma *exponencial*) con la temperatura.

■ Aislantes

- $\sigma < 10^{-8} (\Omega \cdot \text{m})^{-1}$,
[Vidrio $\sim 10^{-11} (\Omega \cdot \text{m})^{-1}$, Poliuretano $\sim 10^{-20} (\Omega \cdot \text{m})^{-1}$]
- $\frac{d\sigma}{dT} > 0$. El comportamiento térmico de los aislantes es idéntico al de los semiconductores. Por este motivo los aislantes y los semiconductores a veces se consideran el mismo tipo de materiales en cuanto a su comportamiento respecto a la conductividad eléctrica. Su única diferencia consiste en el valor de dicha conductividad a temperatura ambiente.

Para explicar el comportamiento cuantitativo y cualitativo de los diversos materiales respecto a la conductividad eléctrica se han propuesto básicamente tres modelos diferentes:

1. Modelo clásico del electrón libre: Modelo de Drude-Lorentz.
2. Modelo cuántico del electrón libre: Modelo de Sommerfeld.
3. Modelo cuántico del electrón ligado: Modelo de Bloch.

Dado que los dos primeros modelos tratan sobre *electrones libres*, el presente tema estará dedicado a ellos, dejándose el tercer modelo para el siguiente tema.

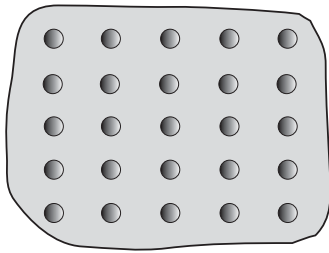
4.2. Modelo clásico del electrón libre

Este primer modelo, desarrollado a finales del siglo XIX y principios del XX (después del descubrimiento de los electrones en 1897), propone una teoría clásica para la conducción eléctrica en los *metales*. El modelo parte del hecho de que muchos metales presentan estructuras reticulares y asume que las fuerzas de cohesión de los metales se deben al tipo particular de enlace que presentan, esto es, el **enlace metálico**. En los sólidos que presentan este tipo de enlace, se supone que

los portadores de carga de la corriente serán los electrones libres que provienen de que cada átomo del metal cede uno o varios de sus electrones de sus últimas capas (electrones de valencia) para formar una especie de *gas* de electrones común a todo el sólido. La cohesión del sólido se debe precisamente a la interacción entre los iones positivos y el gas de electrones libres que los rodea.

4.2.1. Hipótesis básicas

Partiendo de las ideas anteriores, el **modelo de Drude-Lorentz** propone que los metales están constituidos por



- Un resto de iones positivos esencialmente estáticos que están regularmente distribuidos
- +
- Conjunto de electrones de valencia que vagan libremente por el metal. Estos electrones forman un **gas clásico**.

Aplicando las ideas de la teoría cinética de los gases, se supone que los electrones de este gas clásico están en constante agitación térmica (con un movimiento de desplazamiento neto nulo). La interacción entre el gas de electrones y los restos iónicos se realiza mediante choques elásticos continuos debido al movimiento térmico caótico de los electrones. Siguiendo el razonamiento presentado en el Apartado 3.2, el cálculo sobre la velocidad térmica promedio, v_T , de estos electrones puede hacerse al considerar que

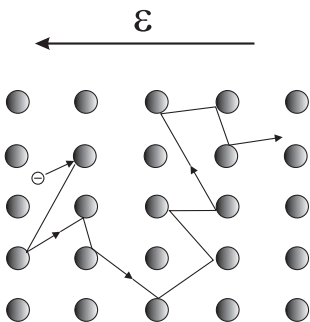
$$\langle E_c \rangle = \frac{3}{2} k_B T$$

y

$$\langle E_c \rangle = \frac{1}{2} m_e v_T^2 .$$

Al igualar las dos expresiones anteriores, encontramos que

$$\begin{aligned} v_T &= \sqrt{\frac{3k_B T}{m_e}} \\ &= [T \approx 300\text{K}] \sim 10^5 \text{ m/s} . \end{aligned} \tag{4.10}$$



En presencia de un campo eléctrico externo, $\mathcal{E}$, los electrones adquieren obviamente una aceleración, $\mathbf{a} = -e\mathcal{E}/m_e$. No obstante, estos electrones sufrirán continuos choques contra los restos iónicos, lo que provocará una desaceleración continuada. El efecto combinado del campo externo junto con estos choques da lugar a un movimiento de desplazamiento que en promedio es uniforme y caracterizado por cierta velocidad de arrastre, $\mathbf{v}_a$ (superpuesta a la anterior velocidad

térmica). Un cálculo aproximado de esta velocidad de arrastre de los electrones nos dice que

$$\mathbf{v}_a = \mathbf{a}\tau = -\frac{e\mathcal{E}}{m_e}\tau, \quad (4.11)$$

siendo τ el *tiempo promedio entre colisiones*. Dado que la densidad de corriente, $\mathbf{J}$, puede escribirse como

$$\mathbf{J} = n(-e)\mathbf{v}_a = \frac{ne^2\tau}{m_e}\mathcal{E}, \quad (4.12)$$

se encuentra que ésta es proporcional al campo aplicado, justificándose de este modo la expresión (4.3) para la ley de Ohm. El coeficiente de proporcionalidad entre $\mathbf{J}$ y $\mathcal{E}$ nos proporciona la siguiente expresión para la conductividad eléctrica:

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m_e}. \quad (4.13)$$

Conductividad eléctrica según modelo de Drude

EJEMPLO 4.1 Estimación de la velocidad de arrastre

Sea una situación típica en la que un conductor filiforme de Cu es recorrido por una intensidad $I = 100 \text{ mA}$, siendo la sección del conductor $S = 1 \text{ mm}^2 = 10^{-6} \text{ m}^2$ y la masa atómica y la densidad del cobre: $A = 64$, $\rho = 9 \text{ g/cm}^3$.

Dado que

$$J = \frac{I}{S} = nev_a,$$

encontramos que la velocidad de arrastre puede expresarse como

$$v_a = \frac{I}{Sne}.$$

La única magnitud que no conocemos en este problema es la densidad de electrones libres en el Cu. Para ello considérese que

$$\begin{aligned} n &\equiv \text{número de } e^- \text{ en } 1 \text{ m}^3 \\ &= \nu \cdot \mathcal{N}_A \cdot \text{número de moles en } 1 \text{ m}^3, \end{aligned}$$

donde ν es el número de electrones de valencia (que en el caso del Cu es 1). El número de moles por m^3 , χ , puede calcularse como

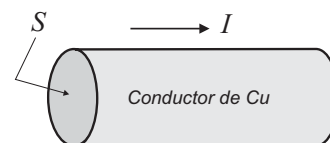
$$\chi = \frac{\text{masa de } 1 \text{ m}^3}{\text{masa de } 1 \text{ mol}} = \frac{\rho(\text{gr/m}^3)}{A}.$$

Para la densidad de electrones en el Cu obtenemos entonces que

$$n = 1 \cdot 6,023 \times 10^{23} \cdot \frac{9 \times 10^6}{64} \approx 8,47 \times 10^{28} \text{ m}^{-3},$$

por lo que la velocidad de arrastre será

$$v_a = \frac{0,1}{8,47 \times 10^{28} \cdot 1,6 \times 10^{-19} \cdot 10^{-6}} \approx 7,4 \mu\text{m/s}.$$



Puede comprobarse que el valor obtenido de la velocidad de arrastre de los electrones es mucho menor que el que se obtuvo para su velocidad térmica —ver expresión (4.10). En multitud de casos puede, por tanto, concluirse que

Veloc. arrastre $\ll$ Veloc. térmica

$$v_a \ll v_T$$

4.2.2. Dependencia con la temperatura

La expresión (4.13) ofrecía el valor de la conductividad en función de la densidad de portadores de carga, n , y del tiempo promedio entre colisiones, τ . Podemos, por tanto, obtener una expresión más detallada de σ si previamente estimamos el valor de τ . Para ello, debemos considerar que el tiempo entre colisiones, τ , vendrá determinado por el cociente entre la distancia promedio entre colisiones, L_0 (en este modelo $L_0 \sim$ distancia entre iones de la red) y la velocidad de los electrones. Dado que la velocidad térmica es generalmente mucho mayor que la velocidad de arrastre (ver Ejemplo 4.1), consideraremos que la velocidad de los electrones puede aproximarse con buena precisión por la velocidad térmica, por lo que tendremos que

$$\tau = \frac{L_0}{v_T} = \frac{L_0}{\sqrt{\frac{3k_B}{m_e} T}}, \quad (4.14)$$

donde se ha usado la expresión (4.10) para v_T en función de la temperatura. Al introducir (4.14) en (4.13) se obtiene finalmente que

$$\sigma = \frac{ne^2 L_0}{\sqrt{3k_B m_e}} T^{-1/2}. \quad (4.15)$$

La expresión anterior nos permite obtener la conductividad eléctrica de los metales en función de la densidad de portadores, de la distancia promedio entre colisiones y de la temperatura de trabajo. En concreto nos dice que la conductividad disminuye si la temperatura aumenta, de acuerdo con la observación experimental hecha para los metales.

EJEMPLO 4.2 Obtenga la conductividad del cobre a temperatura ambiente sabiendo que $n = 9 \times 10^{28} \text{ m}^{-3}$ y $L_0 = 3,6 \text{ \AA}$.

Teniendo en cuenta los datos anteriores y usando la expresión (4.15) tenemos que

$$\begin{aligned} \sigma &= \frac{9 \times 10^{28} \cdot (1,6 \times 10^{-19})^2 \cdot 3,6 \times 10^{-10}}{\sqrt{3 \cdot 1,38 \times 10^{-23} \cdot 9,1 \times 10^{-31}}} \times 300^{-1/2} \\ &\approx 0,78 \times 10^7 (\Omega \cdot \text{m})^{-1} \end{aligned}$$

4.2.3. Fallos del modelo de Drude

Aunque el modelo clásico del electrón libre pudo explicar de forma cualitativa la forma de la ley de Ohm y la disminución de la conductividad al aumentar la temperatura (y algunas otras cuestiones que no se han tratado aquí), este modelo no es todavía muy satisfactorio dado que presenta los siguientes fallos:

- Sólo es aplicable a metales (conductores), de modo que no predice el diferente comportamiento de los conductores y semiconductores / aislantes.
- Predice un comportamiento de la conductividad de los metales con la temperatura del tipo $\sigma(T) = \sigma_0 T^{-1/2}$, que no explica el comportamiento *experimental*, $\sigma(T) \sim T^{-1}$, encontrado para los conductores.
- La expresión (4.15) predice resultados para la conductividad más bajos que los obtenidos experimentalmente.
- No explica la aparente presencia de cargas *positivas* (predicha por el efecto Hall) como portadores de carga en algunos metales.
- Aunque no se ha tratado aquí, es también conveniente señalar que este modelo predice un calor específico ($C_v = dE/dT$) para los metales mucho mayor (del orden de 10^4 veces) que el observado experimentalmente.

4.3. Modelo cuántico del electrón libre

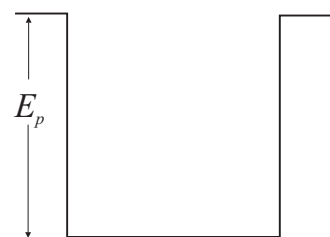
Debido a las inexactitudes del modelo clásico del electrón libre, Sommerfeld desarrolló posteriormente un modelo basado en la teoría cuántica para describir el comportamiento de los electrones libres. Básicamente, el modelo cuántico del electrón libre sigue el modelo de Drude respecto a las hipótesis que hace del sólido pero introduce dos importantes consideraciones respecto a los electrones:

1. Los electrones deben ser considerados como entes *cuánticos*.
2. Los electrones obedecen el principio de exclusión de Pauli.

Estas consideraciones implican que el conjunto de electrones debe ser considerado ahora como un **gas cuántico** (también conocido como *gas de Fermi*) en vez de un gas clásico tal como se hacía en el anterior modelo clásico.

El hecho de considerar ahora el conjunto de electrones como un gas cuántico se manifiesta en que su tratamiento estadístico, realizado mediante

$$dN(E) = g(E) f(E) dE ,$$



Modelo monodimensional de la E_p de los e^- en el interior del conductor.

hace uso de una función densidad de estados, $g(E)$, y una función distribución, $f(E)$, distintas a las usadas para describir el gas clásico. (Según se vio en la expresión (3.9), la función distribución del gas clásico era la de Maxwell-Boltzmann).

4.3.1. Función densidad de estados

La función densidad de estados, $g(E)$, para los electrones considerados como entes cuánticos ya fue estudiada en el Apartado 2.2.3 cuando se estudiaron los niveles energéticos de una partícula cuántica en un pozo tridimensional. Según se vio, los electrones estarían caracterizados por una terna de números cuánticos (n_x, n_y, n_z) , que debido a la degeneración de los niveles de energía daba lugar a la siguiente función degeneración o función densidad de estados:

$$g(E) = \frac{\pi}{4E_0^{3/2}} E^{1/2} \quad (4.16)$$

con

$$E_0 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_e a^2}.$$

Si tenemos también en cuenta el *spin* (ver Apartado 2.4.2) junto con su correspondiente número cuántico, m_s , los electrones de conducción en el modelo de Sommerfeld vendrán finalmente caracterizados por la siguiente cuaterna de números cuánticos

$$(n_x, n_y, n_z, m_s)$$

La introducción de este nuevo número cuántico introduce una nueva doble degeneración (que no fue tomada en cuenta en el Apartado 2.2.3), de modo que la función densidad de estados que debe usarse será la dada en (4.16) multiplicada por 2, esto es,

$$\begin{aligned} g(E) &= \frac{\pi}{2E_0^{3/2}} E^{1/2} = \frac{(2m_e)^{3/2} V}{2\hbar^3 \pi^2} E^{1/2} \\ &= \frac{8\pi V (2m_e^3)^{1/2}}{h^3} E^{1/2}, \end{aligned} \quad (4.17)$$

donde V es el volumen del sólido.

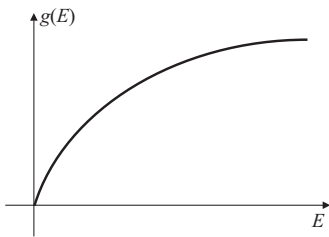
4.3.2. Distribución de Fermi-Dirac

En el Apartado 3.2 ya se discutió que la función distribución para el gas clásico de electrones venía dada por

$$f_{\text{MB}}(E) \sim e^{-E/k_B T} \quad (\text{gas clásico}). \quad (4.18)$$

Para el presente caso de un gas cuántico de electrones, la introducción del carácter cuántico del electrón junto con el principio de exclusión de

Números cuánticos del electrón
en el modelo de Sommerfeld



Pauli nos conduciría a la función distribución de Fermi-Dirac, $f_{\text{FD}}(E)$, cuya forma matemática es

$$f_{\text{FD}}(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right) + 1}, \quad (4.19)$$

siendo E_F la **energía de Fermi** que puede definirse, para nuestros propósitos, como el valor de energía para el cual la función distribución vale $1/2$.

Es interesante notar que tomando el límite para valores altos de la energía ($E \gg E_F$), el término exponencial es mucho mayor que la unidad en el denominador de (4.19) y, en consecuencia, la distribución de Fermi-Dirac se hace básicamente idéntica a la distribución de Maxwell-Boltzmann:

$$f_{\text{FD}}(E) \xrightarrow{E \gg E_F} f_{\text{MB}}(E). \quad (4.20)$$

Si analizamos con detenimiento la dependencia de (4.19) con respecto a la temperatura, nos encontramos con que a $T = 0 \text{ K}$, la función distribución de Fermi-Dirac equivale a la siguiente función *escalón*:

$$f_{\text{FD}}(E) = \begin{cases} 1 & \text{si } E < E_F \\ 0 & \text{si } E > E_F \end{cases}, \quad (4.21)$$

esto es, todos los estados presentan probabilidad unidad de ocupación si $E < E_F$ y probabilidad nula si $E > E_F$. Podemos comprobar que esta propiedad apenas varía con la temperatura, excepto en la región donde

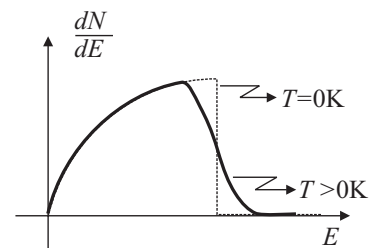
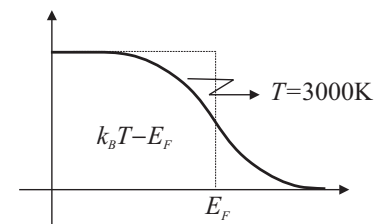
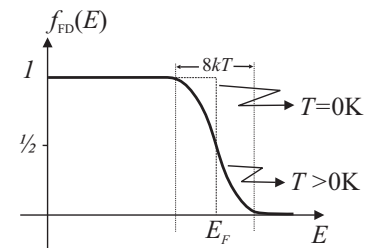
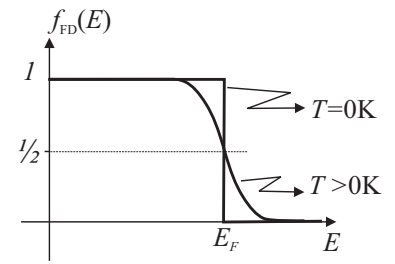
$$|E - E_F| \lesssim 4k_B T,$$

puesto que fuera de esa región $f_{\text{FD}}(E)$ toma valores muy próximos a 0 o bien a 1. Teniendo en cuenta el hecho de que la energía de Fermi para la mayoría de los conductores y semiconductores a temperatura ambiente se encuentra que es $1 \text{ eV} < E_F < 8 \text{ eV}$ y que

$$k_B T (300 \text{ K}) \approx 0,025 \text{ eV}, \quad (4.22)$$

podemos observar que la función $f_{\text{FD}}(E)$ sólo mostrará cambios apreciables (respecto a su comportamiento para $T = 0 \text{ K}$) para temperaturas muy altas, $T \gtrsim 3000 \text{ K}$. Esto implicará que en muchos casos de interés práctico (por ejemplo, a temperatura ambiente), en vez de usar la expresión *complicada* (4.19) puede usarse directamente la función escalón (4.21).

Bajo las condiciones anteriores, la distribución de portadores de carga con respecto a la energía, dN/dE , muestra entonces que a $T > 0 \text{ K}$ existen *pocos* electrones con energías mayores que E_F . Esto quiere decir que a temperatura ambiente y similares, la distribución de energía es básicamente la misma que la que se encuentra a $T = 0 \text{ K}$. Físicamente, esto implica que un aumento moderado de la temperatura respecto a $T = 0 \text{ K}$ tiene muy poco efecto en el gas cuántico de electrones.



Cálculo de la energía de Fermi

Teniendo en cuenta las consideraciones anteriores respecto a la dependencia con la temperatura de la distribución de Fermi-Dirac, encontramos que en multitud de situaciones prácticas podemos escribir

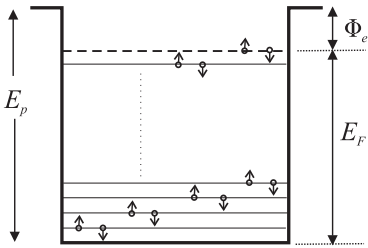
$$dN(E) = g(E) f_{FD}(E) dE \approx g(E) \cdot \begin{cases} 1 & \text{si } E < E_F \\ 0 & \text{si } E > E_F \end{cases} \cdot dE. \quad (4.23)$$

Si aplicamos la expresión anterior a un modelo simple de un conductor, encontraríamos que el número total de electrones, N , en el conductor vendría dado por

$$N = \int_0^\infty dN(E) \approx \int_0^{E_F} dN(E) = N(E_F), \quad (4.24)$$

es decir,

el nivel de Fermi, E_F , puede identificarse con el máximo valor de la energía correspondiente a un estado ocupado, existiendo como máximo dos electrones en cada nivel de energía.



Modelo monodimensional que muestra la energía de Fermi de los e^- en el conductor

Dado que el número de electrones con energías $E \leq E_F$ serán precisamente todos los del conductor, encontramos que

$$N(E_F) = nV. \quad (4.25)$$

Por otra parte, teniendo en cuenta (4.23), $N(E_F)$ puede calcularse como

$$\begin{aligned} N(E_F) &= \int_0^{E_F} g(E) dE \\ &= \int_0^{E_F} \frac{8\pi V (2m^3)^{1/2}}{h^3} E^{1/2} dE = \frac{8\pi V (2m^3)^{1/2}}{h^3} \frac{2}{3} E_F^{3/2}. \end{aligned} \quad (4.26)$$

Igualando ahora los resultados de las expresiones (4.25) y (4.26), podemos concluir que

Energía de Fermi en un conductor

$$E_F = \frac{h^2}{2m_e} \left(\frac{3n}{8\pi} \right)^{2/3}. \quad (4.27)$$

Puede comprobarse que para los metales típicos ($n \sim 10^{28} \text{ m}^{-3}$), los valores de la energía de Fermi se encuentran entre $E_F \sim 2 - 8 \text{ eV}$, tal como se supuso anteriormente.

Cálculo de la energía promedio del gas de Fermi

El cálculo de la energía promedio de los electrones del gas de Fermi puede realizarse a partir de la expresión encontrada para $dN(E)$

mediante el siguiente cálculo:

$$\langle E_c \rangle = \frac{\int_0^\infty E dN(E)}{\int_0^\infty dN(E)} = \frac{\int_0^{E_F} E CE^{1/2} dE}{\int_0^{E_F} CE^{1/2} dE} = \frac{3}{5} E_F \quad (4.28)$$

(EdN puede interpretarse como la *energía* de aquellas partículas cuyos estados de energía están comprendidos entre E y $E + dE$).

Si queremos encontrar la temperatura, T_{gF} , a la cual la energía de un electrón en un *gas clásico* ($3/2 k_B T_{gF}$) sería igual a la energía obtenida previamente en (4.28) para un electrón en un *gas cuántico*, entonces al igualar ambas energías

$$\frac{3}{2} k_B T_{gF} = \frac{3}{5} E_F$$

encontramos que

$$T_{gF} = \frac{2E_F}{5k_B}.$$

Puede comprobarse que esta temperatura es del orden de $10^4 K$, lo que explicaría porqué un aumento de la temperatura del gas de Fermi apenas variará su energía promedio y por tanto el valor del calor específico de este gas es tan bajo (con respecto al predicho por el modelo de Drude, en el cual un aumento de la temperatura del gas sí tiene un efecto muy apreciable sobre el valor de la energía promedio).

4.3.3. Conducción eléctrica

En el contexto del modelo cuántico del electrón libre, la dinámica de los electrones no viene regida por las colisiones de los portadores con los restos iónicos sino que, por el contrario, la dinámica de los electrones estará determinada por el proceso de *propagación* de la función de onda asociada a los electrones en el entorno constituido por los restos iónicos. En principio caben señalarse varios puntos:

- Al contrario de lo ocurre en los procesos térmicos, en el proceso de conducción eléctrica participan *todos* los electrones del gas de Fermi. Esto se debe a la posibilidad que tienen todos los electrones de aumentar de forma coherente su energía y por tanto de desplazarse a un nivel de energía superior sin por ello violar el principio de exclusión.
- Al estudiar la dinámica de los electrones sometidos a un campo eléctrico externo, el fenómeno ondulatorio análogo a lo que antes se visualizó como *colisiones* vendrá ahora dado por la dispersión de la onda electrónica por los iones, es decir, por las reflexiones de Bragg de la onda electrónica en su interacción con la red cristalina. No obstante, para situaciones típicas, se encuentra

que no se dan las condiciones para que se produzcan estas reflexiones y, por tanto, los electrones podrían vagar *libremente* por la red sin que ésta les ofreciera resistencia alguna (lo que daría lugar a un valor de conductividad infinito).

El origen de una conductividad finita no se debe entonces al proceso anterior de choques sino que surge fruto de la *dispersión* de las ondas electrónicas por las imperfecciones (impurezas y vibraciones térmicas) en la periodicidad del cristal. En particular, el efecto más importante proviene de las vibraciones térmicas de los iones en la red. El efecto de estas vibraciones es *aumentar* la sección eficaz de los iones dando lugar a una dispersión apreciable. Los cálculos muestran que el camino libre medio entre colisiones viene dado por

$$L_0 \propto T^{-1}, \quad (4.29)$$

lo que implica que $\sigma \propto T^{-1}$, en acuerdo con la observación experimental.

4.3.4. Fallos del modelo de Sommerfeld

A pesar de los éxitos de este modelo al explicar el diferente comportamiento térmico y eléctrico de los electrones así como la correcta dependencia de la conductividad con la temperatura, algunos de los puntos que este modelo no explica son:

- Existencia de conductores y semiconductores/aislantes y porqué presentan comportamientos cualitativos distintos respecto a la temperatura.
- Gran dependencia de las propiedades de conducción de los semiconductores respecto al número de impurezas añadidas.
- Existencia aparente de portadores de carga positiva, tal y como señala el efecto Hall en algunos metales y semiconductores dopados.

4.4. Problemas propuestos

4.1: Para un hilo de cobre cuya área transversal es 5 mm^2 : **a)** ¿cuál debería ser la intensidad de corriente que lo recorriese para que la velocidad de arrastre de los electrones fuese igual a la velocidad térmica a temperatura ambiente?; **b)** discuta si se seguiría cumpliendo en las anteriores condiciones la ley de Ohm.

4.2: Usando para el cobre los siguientes valores: $a = 3,7 \text{ Å}$ y $v(300 \text{ K}) = 1,08 \times 10^5 \text{ m/s}$, calcular la resistividad a $T = 300, 200$ y 100 K .

Sol. $\rho(300 \text{ K}) = 1,22 \times 10^{-7} \Omega \cdot \text{m}$; $\rho(200 \text{ K}) = 9,96 \times 10^{-8} \Omega \cdot \text{m}$; $\rho(100 \text{ K}) = 7,05 \times 10^{-8} \Omega \cdot \text{m}$.

4.3: ¿En qué intervalo de energía, expresado en unidades de $k_B T$, la función distribución de Fermi-Dirac cambia de valor 0.90 a 0.10?

Sol.: $4,4 k_B T$.

4.4: Estimar la fracción de electrones libres en el cobre que están excitados a temperatura ambiente. $E_F(\text{Cu}) = 6.95 \text{ eV}$.

Sol.: 1 %.

4.5: Calcular la energía de Fermi y la temperatura de Fermi para el oro y el hierro sabiendo que la densidad electrónica es $n(\text{Au}) = 5,90 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ y $n(\text{Fe}) = 17 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$.

4.6: Considere un sistema con N partículas que únicamente dispone de dos estados de energía accesibles: $E_1 = E$ y $E_2 = -E$. Si la probabilidad de ocupación de un nivel de energía a temperatura T viene dada por la distribución de Maxwell-Boltzmann $f = e^{-E/(k_B T)}$, calcule **a)** la proporción de partículas, N_1 / N_2 , en los niveles E_1 y E_2 , **b)** la cantidad de partículas en cada nivel de energía y **c)** la energía total del sistema U .

Sol.: **a)** $N_1 / N_2 = e^{-2E/kT}$; **b)** como $N = N_1 + N_2$, $N_1 / N = 1 / (1 + e^{2E/kT})$, $N_2 / N = e^{2E/kT} / (1 + e^{2E/kT})$; **c)** $U = N_1 E_1 + N_2 E_2 = -NE \tanh(E/kT)$.

4.7: En la distribución de Fermi si $\Delta E = E - E_F$, calcule $f_{FD}(E)$ para $\Delta E = 2k_B T$, $4k_B T$, $10k_B T$. ¿Qué conclusiones puede extraer de los anteriores resultados?. Demuestre igualmente que $f_{FD}(E_F - \Delta E) = 1 - f_{FD}(E_F + \Delta E)$ y discuta los resultados.

4.8: A una temperatura de 300 K ($E_F = 5,1 \text{ eV}$): (a) ¿cuál es la probabilidad de que un estado esté ocupado para energías de 5 y 6 eV?; (b) ¿a qué temperatura la probabilidad de ocupación del estado de energía $E = 5,2 \text{ eV}$ es de 0.1?

Sol.: (a) 0.979, $7,08 \times 10^{-16}$; (b) $T = 528 \text{ K}$.

4.9: Sabiendo que la energía de Fermi para el cobre es de 7.0 eV, determínese a 1000 K : (a) la energía a la que la probabilidad, $f_F(E)$, del estado que ocupará un electrón de conducción sea de 0.9; (b) la función distribución de estados o densidad de estados, $g(E)$, por unidad de volumen; y (c) la función de distribución de partículas $dn(E) = g(E) f_{FD}(E)$.

Sol.: 6.81 eV; $1,79 \times 10^{28} \text{ m}^{-3} \text{ eV}^{-1}$; $1,6 \times 10^{28} \text{ m}^{-3} \text{ eV}^{-1}$.

4.10: Un cubo muy pequeño de Cu tiene 0.1 mm de lado. ¿Cuántos electrones de conducción contiene que posean energías comprendidas entre 5 y 5.025 eV?

Sol.: $3,8 \times 10^{14}$ electrones.

4.11: El magnesio es un metal bivalente con un peso atómico de 24.32 g/mol y una densidad de 1.74 g/cm^{-3} . (a) ¿Cuál es la densidad de electrones libres?; (b) ¿Cuál es la energía de Fermi?; y (c) ¿Cuál es la longitud de onda de De Broglie de los electrones en el nivel de energía de Fermi?.

Sol.: (a) $8,4 \times 10^{28} \text{ m}^{-3}$; (b) $E_F = 7,07 \text{ eV}$; (c) $\lambda = 4,62 \text{ \AA}$.

4.12: Los niveles energéticos electrónicos en un pozo infinito de potencial tridimensional están dados por la expresión: $E(n_1, n_2, n_3) = E_0(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)$. Encontrar las diferencias fraccionales, $[E(n_i, n_j, n_k) - E(n'_i, n'_j, n'_k)] / E(n_i, n_j, n_k)$, en la energía entre los pares de estados dados por: (a) $E(1, 1, 1)$ y $E(1, 1, 2)$; (b) $E(10, 10, 10)$ y $E(9, 10, 11)$; y (c) $E(100, 100, 100)$ y $E(99, 100, 101)$. (d) ¿Qué conclusión puede ser deducida de estos resultados?

4.13: Si admitimos que, según la teoría cuántica del electrón libre, la energía media de un electrón el cobre viene dada por

$$\langle E \rangle = \frac{3}{5} E_F + \frac{\pi^2}{4} \frac{k_B T}{E_F} k_B T,$$

calcule dicha energía a temperatura ambiente ($E_F = 7,03 \text{ eV}$) y compare el anterior valor con la energía media a $T = 0 \text{ K}$ y con el valor clásico $3k_B T/2$.

Sol. $\langle E(300 \text{ K}) \rangle = 4,2182 \text{ eV}$, $\langle E(0 \text{ K}) \rangle = 4,2180 \text{ eV}$, $3k_B T/2 = 3,88 \times 10^{-2} \text{ eV}$.

4.14: Si consideramos a la velocidad de Fermi, definida como $v_F = \left(\frac{2E_F}{m_e} \right)^{1/2}$, como aquella que adquieren los electrones de conducción en el gas de Fermi, calcule el recorrido libre medio, l , de los electrones en el oro sabiendo que $E_F = 5,53 \text{ eV}$ y $\rho = 2,04 \mu\Omega \cdot \text{cm}$. Compare este valor con la distancia promedio entre átomos y discuta el resultado.

Sol. $l = 414 \text{ \AA}$.

4.15: Calcule la energía de Fermi (el valor de la energía del último estado lleno a $T = 0 \text{ K}$) para un conductor “monodimensional” que consta de 23 electrones en un pozo de potencial monodimensional de paredes infinitas y anchura $6 \text{ \AA}$. Tenga en cuenta que el principio de exclusión prohíbe la existencia de más de dos electrones en el mismo estado cuántico.

Sol. $E_F = 149,4 \text{ eV}$.

Capítulo 5

Electrones en una red periódica

5.1. Modelo cuántico del electrón ligado

En los dos modelos expuestos en el tema anterior se supuso que los electrones de conducción en los sólidos eran *libres*, o equivalentemente que su energía potencial en el interior del sólido era *constante*. No obstante, las carencias de los modelos basados en esta suposición (válidos únicamente para explicar propiedades de los metales) nos sugiere que el modelo del electrón libre debe revisarse. Un posible paso adelante que supera este modelo debe tomar en consideración la interacción electrostática de los electrones con la estructura cristalina del sólido. Puesto que la aparición de este potencial periódico proviene del efecto conjunto de todos los iones positivos de la red (que están regular y periódicamente distribuidos), esta interacción quedaría descrita en el modelo admitiendo que

- Gas cuántico de electrones está sometido a un **potencial periódico**, esto es,

$$E_p(\mathbf{r}) = E_p(\mathbf{r} + \mathbf{T}) , \quad (5.1)$$

donde $\mathbf{T}$ es un vector traslación de la red cristalina (ver Apartado 3.3). Para una red finita *monodimensional* de periodo a , la Figura 5.1 muestra el aspecto de este potencial.

La forma rigurosa de abordar el problema anterior requiere la resolución de la ecuación de Schrödinger teniendo en cuenta el hecho de que el potencial es periódico. Para el caso monodimensional esto implicaría resolver la siguiente ecuación:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2\psi}{dx^2} + E_p(x)\psi = E\psi \quad (5.2)$$

siendo

$$E_p(x) = E_p(x + a) .$$

$$E_p(\mathbf{r}) = E_p(\mathbf{r} + \mathbf{T})$$

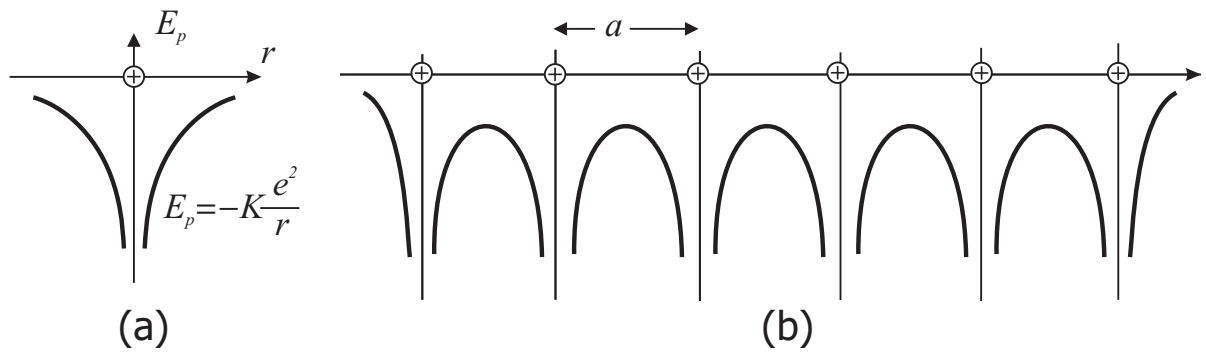


FIGURA 5.1: (a) Energía potencial (o, simplemente, potencial) debida a la interacción coulombiana de un electrón con un ion positivo. (b) Potencial de un electrón en una red monodimensional de iones positivos.

Esta tarea fue llevada a cabo por Bloch, quien encontró que la función de onda de un electrón en la red periódica monodimensional debía ser del tipo

$$\psi(x) = u_k(x)e^{\pm jkx} \quad (5.3)$$

con

$$u_k(x) = u_k(x + a),$$

que puede verse como la función de onda del electrón libre ($e^{\pm jkx}$) modulada por una función $u_k(x)$ que presenta la misma periodicidad que la red.

Operando con este tipo de funciones de onda encontraríamos que los niveles de energía del sólido se agrupan en **bandas de energía**, según nos muestra la relación $E \leftrightarrow k$ en la Figura 5.2(a). La energía

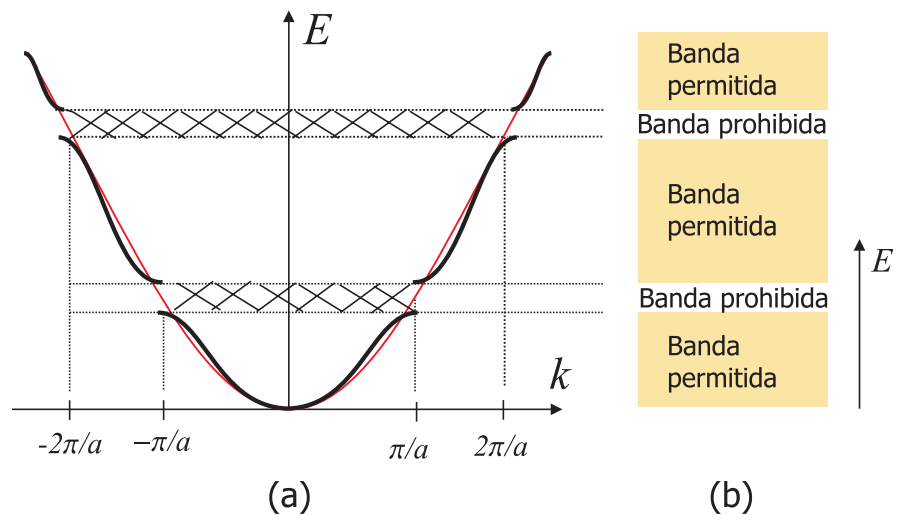


FIGURA 5.2: (a) Relación de dispersión $E \leftrightarrow k$ para un electrón que se mueve en una red periódica monodimensional de periodo a . (b) Diagrama simplificado de bandas de energías permitidas y prohibidas.

$E = E(k)$ es una función continua en ciertos intervalos de k que experimenta “saltos” para determinados valores del número de ondas

($k = n\pi/a$). Las **bandas permitidas** mostradas en la Figura 5.2(b) nos indican aquellos valores de energía que puede tener el electrón mientras que las **bandas prohibidas** señalan los valores de energía que no pueden ser tomados por el electrón.

5.1.1. Aproximación de fuerte enlace

El desarrollo matemático que llevaría a la verificación de la existencia de bandas de energía queda fuera del alcance del presente tema, por lo que optaremos por deducir la existencia de bandas de energía en los sólidos a partir de una versión elemental de la **aproximación de fuerte enlace**. Esta aproximación consiste básicamente en suponer que las funciones de onda de los electrones en los átomos que forman el sólido apenas se extiende más allá de los límites de cada uno de estos átomos.

En el marco de esta aproximación, una manera sencilla de visualizar el efecto del potencial periódico en la formación de las bandas de energía consiste en determinar los niveles energéticos de los electrones en un sólido partiendo de los niveles energéticos de los átomos individuales y observando cómo varían estos niveles cuando los átomos se aproximan lo suficientemente como para formar un sólido. Dado que este estudio es todavía complicado (debido a lo complejo del potencial que siente un electrón en el átomo), partiremos de una situación más simple que modela en lo básico la situación anterior y que consiste en el estudio de la variación de los niveles de energía desde un pozo de potencial monodimensional simple finito hasta el caso del pozo doble finito cuando disminuye la distancia entre los pozos.

Pozo doble de potencial finito

En el caso de un único pozo de potencial finito, las dos primeros niveles de energía, E_1 y E_2 , están relacionados con las funciones de onda mostradas en la Fig. 5.3.

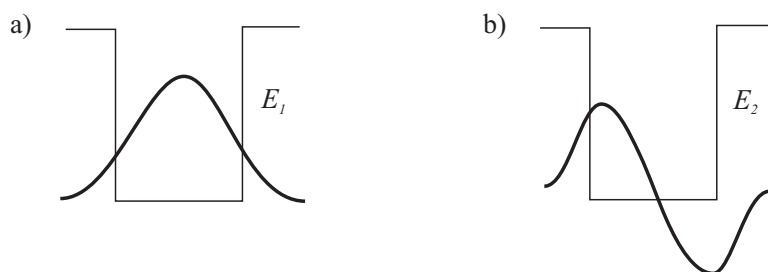


FIGURA 5.3: Función de onda asociada con (a) estado fundamental y (b) primer estado excitado de una partícula en un pozo de potencial finito.

Para el caso del pozo *doble* de potencial finito (Fig. 5.4a), un electrón en el estado fundamental que esté el pozo 1 tendrá una función

de onda, $\psi_1(x)$, que sólo será distinta de cero en las proximidades de dicho pozo (Fig. 5.4b). Análogamente ocurriría para un electrón en el estado fundamental que estuviese en el pozo 2 al que le correspondería una función de onda $\psi_2(x)$ (Fig. 5.4c).

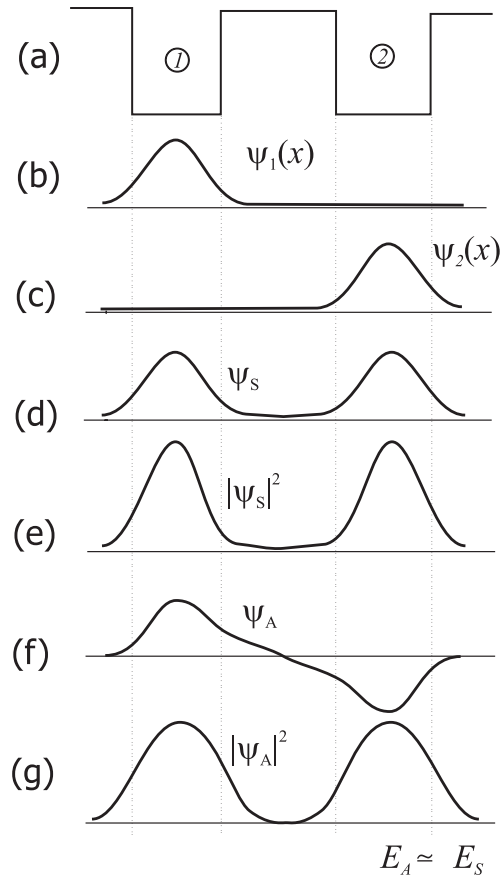


FIGURA 5.4: (a) Pozo doble finito monodimensional. (b) Función de onda asociada de un electrón que está en el pozo 1 en el estado fundamental. (c) Función de onda asociada de un electrón que está en el pozo 2 en el estado fundamental. (d) Función de onda simétrica que representa a un electrón que puede estar con igual probabilidad en ambos pozos. (e) Densidad de probabilidad asociada con el caso anterior. (f) Función de onda antisimétrica que representa a un electrón que puede estar con igual probabilidad en ambos pozos. (g) Densidad de probabilidad asociada con el caso anterior.

Si ahora se considera el caso de un electrón que pudiese estar con igual probabilidad en cualquiera de los dos pozos, la función de onda, $\psi(x)$, que represente este sistema debe tener las siguientes propiedades:¹

1. $\psi(x)$ debe reflejar el hecho de que la partícula se encuentre con igual probabilidad en ambos pozos, por lo que la densidad de

¹Debe tenerse en cuenta que si $\psi(x)$ es una función de onda correspondiente a un nivel de energía E cuya densidad de probabilidad asociada es $|\psi(x)|^2$, $-\psi(x)$ también será solución de la ecuación de Schrödinger y tendrá asociados los mismos valores de energía y densidad de probabilidad que la función $\psi(x)$.

probabilidad, $|\psi(x)|^2$, debe ser simétrica con respecto al punto medio de los dos pozos.

2. $\psi(x)$ debe presentar un aspecto similar en aquellas regiones correspondientes al caso de un electrón localizado en un único pozo.

Teniendo en cuenta las anteriores consideraciones encontramos que sólo existen dos posibilidades compatibles, dando así lugar a la función de onda simétrica, ψ_S (Fig. 5.4d), y antisimétrica, ψ_A (Fig. 5.4f):

$$\begin{aligned}\psi_S &= C(\psi_1 + \psi_2) \\ \psi_A &= C(\psi_1 - \psi_2) .\end{aligned}$$

Si la distancia entre los pozos es considerable, la forma de $|\psi_S(x)|^2$ (Fig. 5.4e) y de $|\psi_A(x)|^2$ (Fig. 5.4g) es muy parecida por lo que la energía de los estados que representan tendrán muy aproximadamente el mismo valor, $E_S \approx E_A$, y diremos que existe degeneración.

Cuando la distancia entre los pozos disminuye, siguiendo los mismos criterios anteriores, la forma de las funciones de onda simétrica y antisimétrica se modificará tal como muestra la Fig. 5.5 Puede verse

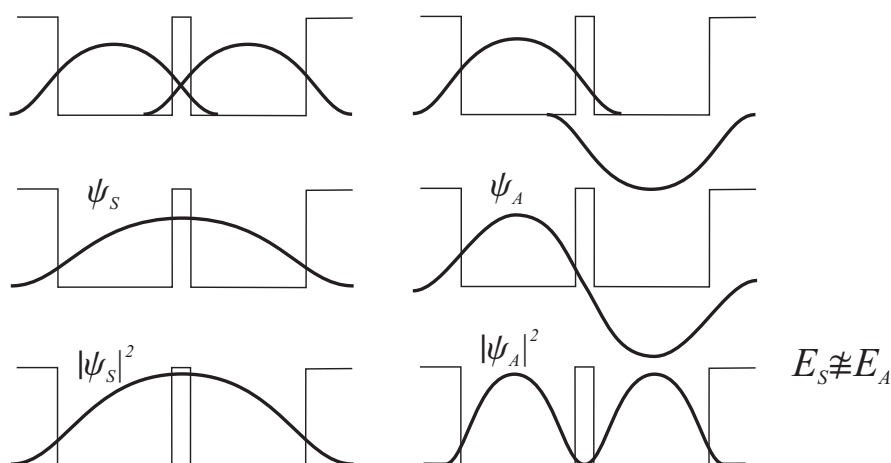


FIGURA 5.5: Forma de las funciones de onda simétrica y antisimétrica cuando los pozos de potencial finito se aproximan.

que la función de onda simétrica, ψ_S , presenta para este caso una forma similar a la función de onda correspondiente al estado fundamental del pozo simple finito de anchura doble (Fig. 5.3a) y, análogamente, la función de onda antisimétrica, ψ_A , es similar a la función de onda del primer estado excitado del pozo simple finito de anchura doble (Fig. 5.3b). Dado que las funciones del pozo simple correspondían a diferentes niveles de energía, puede concluirse que

Al acercar dos sistemas independientes idénticos (con la misma energía) se rompe la degeneración de los dos estados correspondientes a estos sistemas y aparecen dos niveles de energía diferente.

5.1.2. Bandas de energía

A partir del principio básico enunciado anteriormente podemos ahora analizar los cambios en los niveles de energía del electrón en un sistema con dos átomos. Tal como muestra la Fig. 5.6, en este caso, se observaría que los niveles de energía de los electrones más internos (nivel E_1) apenas sufrirían cambios mientras que los niveles de energía de los electrones de las capas más externas (nivel E_2) sí que sufrirían un desdoblamiento. Este hecho se debe a que los electrones más internos apenas serían afectados por la presencia del otro átomo dado que su “entorno de potencial” apenas varía con respecto a la situación en la que se encontraban en cada átomo individual. Por el contrario, el “entorno de potencial” de los electrones externos en el sistema de dos átomos es sustancialmente distinto al que había en un único átomo. El mayor cambio en los niveles energéticos de los electrones más externos puede también interpretarse a partir del *efecto túnel*. Debido al efecto túnel esperamos que los electrones de las capas más externas dejen de estar localizados estrictamente en el entorno de cada átomo individual y pasen a formar parte del sistema en su conjunto, mientras que es muy poco probable que los electrones de las capas más internas atraviesen las barreras de potencial que los rodean.

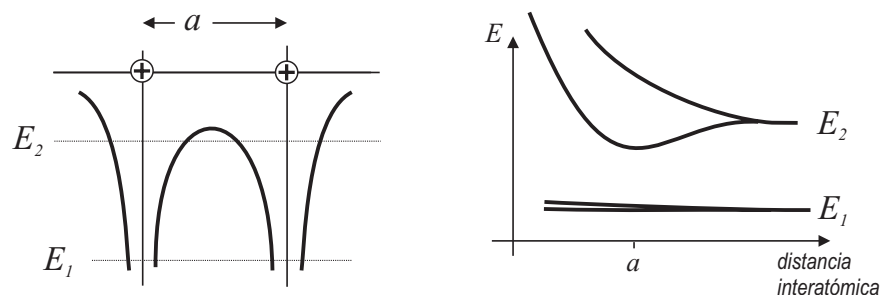


FIGURA 5.6: Modificación de los niveles energéticos asociados a los electrones externos de un sistema de 2 átomos

El fenómeno de desdoblamiento observado para dos átomos puede claramente extenderse a un sistema de más átomos (por ejemplo 5, tal como muestra la Fig. 5.7). En este caso encontraremos que por cada nivel original de las capas del átomo individual aparecerán ahora tantos niveles como átomos haya en el sistema multiatómico. Igualmente observamos cómo los niveles de las capas más externas (nivel E_2) sufre un desdoblamiento más amplio que el correspondiente a las capas más internas (nivel E_1).

Si este modelo se sigue extendiendo hasta completar el número total de átomos del sólido ($n \sim 10^{28} \text{ m}^{-3}$), los niveles *discretos* de energías (correspondientes al “despliegue” de los niveles originales de los átomos individuales) aparecerían ahora tan cerca que darían lugar a una configuración cuasicontinua de niveles energéticos. Debido a esta

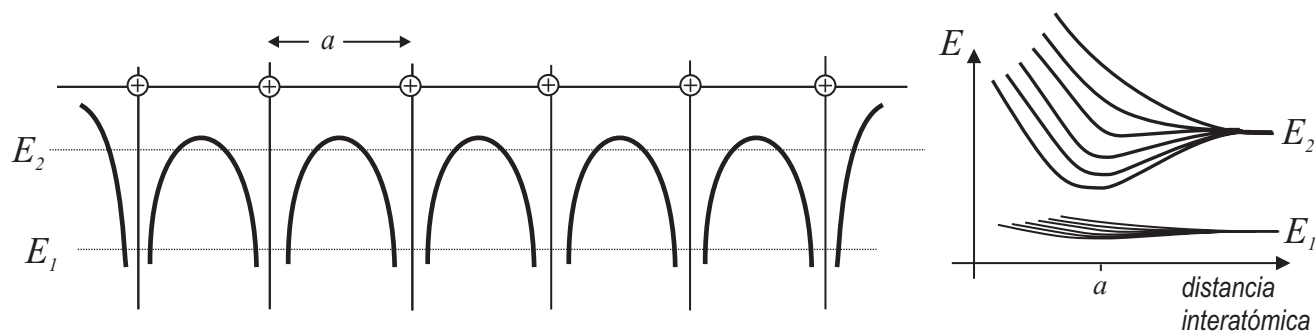


FIGURA 5.7: Modificación de los niveles energéticos asociados a los electrones externos de un sistema monodimensional de N átomos

naturaleza cuasicontinua de la energía, se dice que la configuración energética del sólido muestra **bandas de energía** (ver Fig. 5.8).

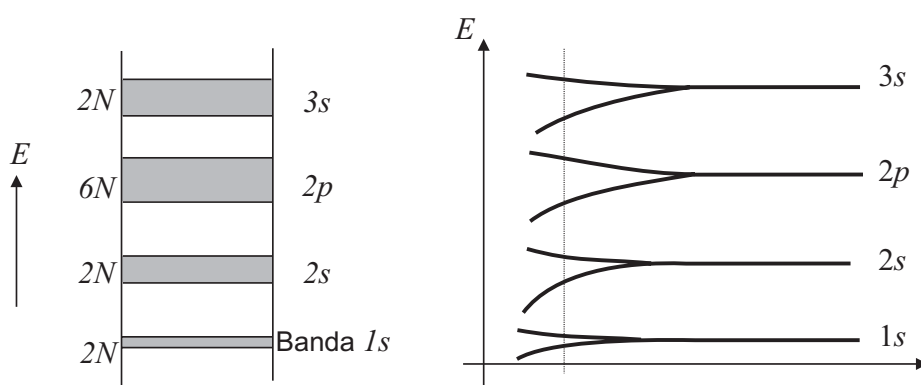


FIGURA 5.8: Aparición de bandas de energía fruto de la pérdida de degeneración de los niveles energéticos asociados a los electrones de un sólido

Debido a que las propiedades físicas de los sólidos dependen básicamente de la configuración de las últimas bandas de energía, éstas serán la de mayor interés para la conductividad eléctrica. La denominación usual para estas últimas bandas es la siguiente:

- **Banda de Valencia (BV):** es la banda de energía más alta conteniendo electrones.
- **Bandas Prohibidas (BP):** corresponden a aquellos valores de energía en los cuales no hay niveles permitidos.
- **Banda de Conducción (BC):** Si la BV está parcialmente llena, esta banda se denomina banda de conducción y si la BV está totalmente llena (a $T = 0\text{ K}$) entonces la BC será aquella banda inocuada inmediatamente superior a la BV.

Debe notarse que la anterior discusión sobre la formación de bandas se basa en un modelo simplificado monodimensional que no ha

tenido en cuenta las características tridimensionales del cristal. Cuando éstas se tienen en cuenta, la formación de bandas de energía puede presentar algunas variaciones importantes respecto al modelo simple presentado anteriormente. En concreto cabe destacar el fenómeno de *hibridación* de bandas, que consiste en la existencia de bandas de energía formadas combinando niveles de energía procedentes de diferentes niveles originales.

5.2. Aislantes, Semiconductores y Conductores

El modelo de bandas expuesto anteriormente podrá explicar satisfactoriamente la existencia de conductores y semiconductores / aislantes. Debe notarse que para que los electrones respondan al campo eléctrico externo (y por tanto contribuyan a la corriente eléctrica), éstos deben poder ganar energía y situarse en estados energéticos superiores. En consecuencia, sólo aquellos electrones que posean estados superiores próximos disponibles *vacíos* y *permitidos* responderán a la acción del campo eléctrico externo. Siguiendo este mismo razonamiento podemos igualmente concluir que aquellos electrones cuyas energías correspondan a las de una banda completamente llena NO contribuirán a la corriente,

$$J_{\text{banda llena}} = 0 . \quad (5.4)$$

Esto implica que los únicos electrones que participarían en el proceso de conducción eléctrica serán aquéllos situados en las bandas superiores (dado que las bandas inferiores estarán totalmente llenas).

Para explicar el comportamiento eléctrico de los sólidos distinguiremos dos situaciones en función de la temperatura: $T = 0\text{ K}$ y $T > 0\text{ K}$.

- A $T = 0\text{ K}$, un sólido que tenga la BV llena será un **aislante** debido a que los electrones en dicha BV no pueden desplazarse hacia niveles más altos de energía en dicha banda bajo la acción de un campo eléctrico externo. La existencia de la BP, en principio, impediría que estos electrones pudieran desplazarse hacia la BC. Por el contrario, si la BV está parcialmente llena, entonces los electrones pueden desplazarse hacia niveles más altos de energía en el interior de dicha banda y el sólido se comportará como un **conductor**. Un *aislante* cuya BP sea relativamente pequeña se denominará **semiconductor**, aunque a $T = 0\text{ K}$, tanto el aislante como el semiconductor se comportan como *aislantes perfectos*. Las situaciones descritas anteriormente se muestran en la Fig. 5.9.
- A $T > 0\text{ K}$ es posible que, en aislantes y semiconductores, algunos electrones de la BV sean excitados térmicamente a la BC

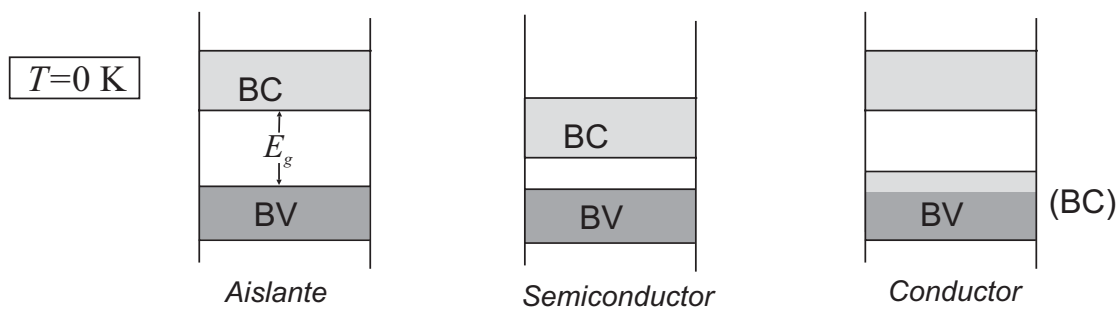


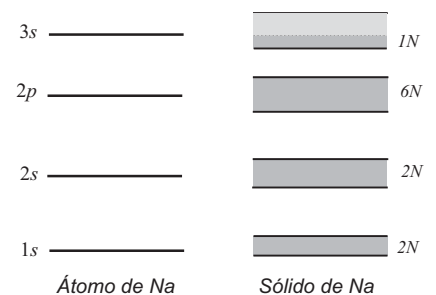
FIGURA 5.9: Situación de las bandas energéticas más externas para Aislante, Semiconductor y Conductor

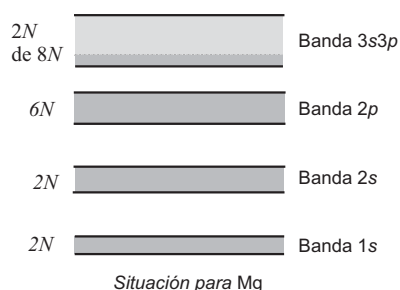
y, por tanto, que haya algunos portadores disponibles para la corriente eléctrica. La probabilidad de salto de electrones de BV a BC será directamente proporcional a la temperatura e inversamente proporcional a la anchura energética, E_g , de la BP. En consecuencia, a mayor E_g menor concentración de electrones en BC y menor valor de conductividad eléctrica. Esto explica el diferente valor a temperatura ambiente de la conductividad eléctrica, σ , dando así lugar a la diferenciación entre aislantes y semiconductores. Por otra parte, dado que para estos materiales, la concentración de electrones en BC aumenta con T , la conductividad crecerá a medida que la temperatura crezca, explicándose así la correcta dependencia de la conductividad con la temperatura para aislantes y semiconductores discutida en el Apartado 4.1.

En los conductores, la situación energética de los electrones *ligados* en la BV parcialmente llena (o BC) es muy similar a la que se encontró en el Tema 4 para los electrones *libres* en el modelo de Sommerfeld dentro del pozo de potencial finito. (Esto explica porqué el modelo de Sommerfeld fue exitoso al predecir las propiedades eléctricas de los metales.) Por tanto, el comportamiento de la conductividad con la temperatura para los conductores según el modelo de bandas es igual al predicho por el modelo de Sommerfeld, esto es, $\sigma \sim T^{-1}$.

Siguiendo los razonamientos anteriores, se podría ahora predecir el carácter eléctrico de los sólidos formados por distintos elementos. Así para un sólido formado por átomos de Na, cuyo número atómico es $Z = 11$ y de configuración $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$, es de esperar que su estructura de bandas sea la mostrada en la figura adjunta. En principio, la banda 3s estaría parcialmente llena y, por tanto, esta banda constituiría una Banda de Conducción, por lo que esperaríamos que este sólido fuese un conductor (suposición que es plenamente confirmada por los hechos experimentales).

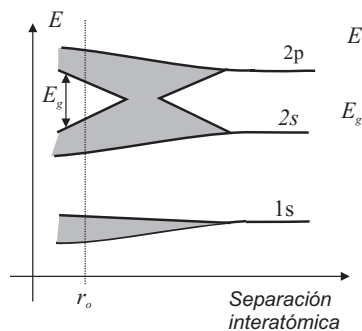
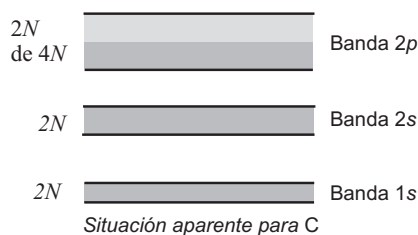
Usando el razonamiento anterior, es de esperar igualmente que





el Mg de $Z = 12$ y configuración electrónica $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$, al tener su última banda con electrones totalmente llena, sea un aislante. No obstante, experimentalmente se encuentra que el Mg es un buen conductor. Para explicar esta importante discrepancia hay que considerar que el modelo de formación de bandas que se ha seguido es un modelo *monodimensional* y, tal como se señaló anteriormente, este modelo sólo nos proporciona las guías básicas para explicar la formación de bandas en los sólidos *tridimensionales*. Los detalles específicos de las bandas de muchos sólidos sólo pueden explicarse a partir de un modelo que tuviese en cuenta el carácter tridimensional del sólido. En este sentido, ha de tenerse en cuenta que tanto el Na como el Mg presentan una **hibridación** de las bandas 3s y 3p para formar una única banda híbrida 3s3p que tendrá en total $8N$ estados energéticos y, en consecuencia, tanto para el Na como para el Mg esta última banda con electrones está parcialmente llena y ambos sólidos serán conductores.

Una discusión análoga puede hacerse para el caso del carbono cristalizado (diamante). El C tiene una configuración electrónica $1s^2 2s^2 2p^2$, de modo que siguiendo el modelo monodimensional debería ser un buen conductor. No obstante, el hecho de que el diamante sea un aislante excelente puede explicarse de nuevo a partir de la formación de una banda híbrida 2s2p con $8N$ estados. Tal como se puede ver en la figura, tras la formación de esta única banda híbrida ocurre una posterior separación de esta banda en dos bandas que podemos llamar banda 2s2p inferior y banda 2s2p superior, cada una de ellas con $4N$ estados energéticos. Cuando se forma el diamante los $6N$ electrones del sólido se situarán de manera que $2N$ van a la banda 1s y los restantes $4N$ a la banda 2s2p inferior, dando lugar a que la última banda con electrones esté totalmente llena. Dado que la separación entre la BV y BC en el diamante es grande ($E_g \sim 6$ eV), el diamante sería muy buen aislante de acuerdo con el modelo de bandas. Ha de notarse que el Si y el Ge tienen la misma configuración electrónica en sus últimas capas e igualmente se produce el mismo tipo de hibridación de bandas (banda 3s3p para Si y banda 4s4p para Ge), por lo que ambos sólidos serían igualmente aislantes a $T = 0$ K. No obstante, la anchura de la banda prohibida entre BV y BC es menor en estos sólidos que en el diamante, por lo que de acuerdo a las discusiones al inicio de esta sección, ambos sólidos serán semiconductores a $T > 0$ K.



5.3. Masa efectiva

Una de las consecuencias más importantes de la existencia de bandas en los sólidos se manifiesta en la respuesta que presentan los electrones ligados a un campo eléctrico externo, $\mathcal{E}$. La distinta respuesta de los electrones en función de su situación en las bandas de energía será recogida por la magnitud *masa efectiva*, m^* . En concreto, esta magnitud nos relacionará directamente la aceleración, a , del electrón con

la fuerza *externa* aplicada, esto es,

$$a = \frac{F_{\text{ext}}}{m^*}. \quad (5.5)$$

Es importante notar lo que la ley de Newton nos dice es que la suma vectorial de *todas* las fuerzas que actúan sobre el electrón (externas más internas) es igual a su masa *real* (m_e) por su vector aceleración,

$$\sum(\text{todas las fuerzas}) = \mathbf{F}_{\text{int}} + \mathbf{F}_{\text{ext}} = m_e \mathbf{a}. \quad (5.6)$$

Esta expresión nos clarifica que en aquellos casos en los que existan fuerzas internas no existirá una relación trivial entre la aceleración y las fuerzas externas dado que será precisamente la masa efectiva (m^*) la que “recogerá” el efecto global de las fuerzas internas.

Electrón libre

Antes de tratar el electrón ligado, repasaremos brevemente las características básicas que se encontraron para el electrón libre. En concreto se encontró que la energía del electrón libre (ver expresión (2.14)) venía dada por la siguiente expresión:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m_e} k^2. \quad (5.7)$$

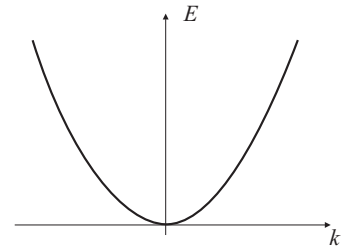
Dado que en el presente caso sólo actúan sobre el electrón la fuerza externa debido al campo eléctrico aplicado ($\mathcal{E}$), tendremos que la ecuación (5.6) viene dada por

$$\mathbf{F}_{\text{ext}} = -e\mathcal{E} = m_e \mathbf{a}, \quad (5.8)$$

de donde obtenemos que el módulo del vector aceleración será

$$a = \frac{e\mathcal{E}}{m_e}. \quad (5.9)$$

En el presente caso vemos que el electrón libre sufre una aceleración inversamente proporcional al valor de su masa inercial m_e , por lo que encontramos que $m^* = m_e$.



Electrón ligado

En este caso veíamos que el electrón estaba sometido al efecto de un potencial periódico del cristal que daba lugar a la aparición de un vector de *fuerzas internas*. Debido a la presencia de estas fuerzas internas podemos asegurar que $m^* \neq m_e$ por lo que debemos emplear algún modelo que nos permita encontrar una expresión adecuada para la magnitud masa efectiva. En concreto usaremos un modelo *semiclásico* del electrón, es decir, haremos uso tanto de argumentos clásicos como de argumentos cuánticos en el análisis.

■ Parte cuántica.

El movimiento del electrón se supone que está regido por las características de propagación de su función de onda asociada. En este sentido, la velocidad del electrón, v , vendrá dada por la *velocidad de grupo* de la onda,

$$v_g = \frac{d\omega}{dk}.$$

Dado que $\omega = E(k)/\hbar$ y $v \equiv v_g$, la velocidad puede expresarse como

$$v(k) = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}. \quad (5.10)$$

■ Parte clásica.

Suponemos que el campo eléctrico aplicado da lugar a fuerzas ordinarias *clásicas*, de modo que podremos usar la ecuaciones de movimiento de la Física Clásica. En este sentido, si la *fuerza externa* realiza un trabajo diferencial, dW , sobre la partícula, la energía de dicha partícula se incrementará en la misma cantidad: $dE = dW$. Para el presente caso tendremos entonces que

$$\begin{aligned} dE &= dW \\ &= F_{\text{ext}} dx = e\mathcal{E} dx = e\mathcal{E} \frac{dx}{dt} dt = e\mathcal{E} v dt \end{aligned} \quad (5.11)$$

y, por tanto, el incremento de energía en el tiempo puede expresarse como

$$\frac{dE}{dt} = e\mathcal{E} v. \quad (5.12)$$

Derivando con respecto al tiempo la ecuación (5.10) encontramos la siguiente expresión para la aceleración:

$$a = \frac{dv(k)}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dt} \left(\frac{dE}{dk} \right),$$

o bien, intercambiando el orden de integración,

$$a = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dk} \left(\frac{dE}{dt} \right). \quad (5.13)$$

Introduciendo ahora (5.12) en (5.13), encontramos

$$a = \frac{e\mathcal{E}}{\hbar} \frac{dv}{dk},$$

que puede reescribirse al sustituir el valor de $v(k)$ dado por (5.10) como

$$a = \frac{e\mathcal{E}}{\hbar} \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk^2} \quad (5.14)$$

o, equivalentemente,

$$a = \frac{e\mathcal{E}}{\left(\frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2}\right)^{-1}}. \quad (5.15)$$

Comparando ahora la expresión (5.15) encontrada para la aceleración de un electrón ligado con la expresión (5.5) podemos concluir que

la respuesta del electrón ligado al campo eléctrico externo aplicado puede verse como la de un electrón libre que estuviese dotado de una masa efectiva, m^ , dada por*

$$m^* = \hbar^2 \left(\frac{d^2 E}{dk^2} \right)^{-1}. \quad (5.16)$$

Definición de masa efectiva para el electrón ligado

EJEMPLO 5.1 Cálculo de la masa efectiva de un electrón libre

De acuerdo a la expresión (5.7)

$$\frac{dE}{dk} = \frac{\hbar^2}{m_e} k \quad \text{y} \quad \frac{d^2 E}{dk^2} = \frac{\hbar^2}{m_e},$$

luego según (5.16) $m^* = m_e$.

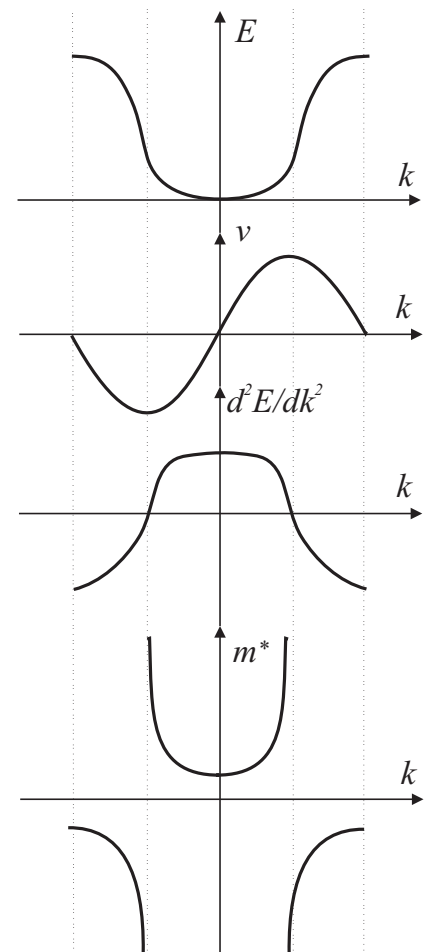
A partir de la forma de la relación de dispersión para el electrón de Bloch (Fig. 5.3a), se pueden deducir cualitativamente algunas importantes características de la masa efectiva del electrón sometido al efecto del potencial periódico de la red. Así, si nos fijamos en la forma de la primera banda energética, su velocidad vendrá dada por

$$v = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk},$$

donde debemos considerar que esta velocidad da cuenta tanto de la acción del campo externo como de la interacción del electrón con la red. Al realizar la derivada de la curva anterior para valores de $k > 0$ se observa que para valores de k próximos a cero, la derivada es una función creciente que alcanza un máximo en el punto de inflexión de $E(k)$ para luego alcanzar un valor nulo en el extremo de la banda. Para obtener la masa efectiva, se procede según

$$m^* = \hbar^2 \left(\frac{d^2 E}{dk^2} \right)^{-1},$$

esto es, se derivará la curva anterior y se invierte. Tras realizar esto, se pueden destacar los siguientes hechos:



1. m^* no presenta el mismo valor que m_e .
2. m^* puede ser mayor que m_e e incluso llegar a ser *infinita*.
3. m^* puede ser menor que m_e e incluso ser *negativa*.

En concreto se ha obtenido que la masa efectiva es

- **positiva** en el borde inferior de la banda y
- **negativa** en el borde superior.

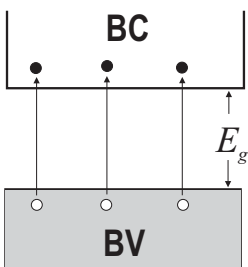
La variación de los valores y signo de la masa efectiva del electrón bajo el efecto conjunto y opuesto del campo eléctrico externo y del potencial periódico de la red puede interpretarse como un balance entre la acción de las fuerzas provenientes del campo externo (a favor del movimiento) y las fuerzas internas de la red (opuestas al movimiento). Cuando $m^* > 0$, el electrón gana energía globalmente dado que la acción del campo externo es superior a la de las fuerzas internas. El punto en el que $m^* \rightarrow \infty$ indicaría que el electrón no se *movería* (como si no respondiese a la acción de $\mathcal{E}$) ya que la acción del campo externo es perfectamente contrarrestada por la acción de las fuerzas internas de la red. La situación en la que $m^* < 0$ podría interpretarse como que en esa zona las fuerzas internas de la red superan a la acción del campo eléctrico externo.

5.4. Huecos

El hecho de que la masa efectiva de los electrones en el borde superior de la banda sea *negativa* tiene unos efectos trascendentales sobre el fenómeno de conductividad eléctrica en el sólido. En este sentido estudiaremos la contribución a la corriente eléctrica de los electrones de una **banda cuasillena**. Esta situación se encuentra típicamente para un semiconductor intrínseco en el que algunos electrones del borde superior de la BV migran hacia la BC por excitación térmica. Como ya hemos discutido, los electrones que han migrado a la BC contribuirán a la corriente eléctrica del modo usual a como lo hacen los electrones libres en los metales. Para tratar la contribución a la corriente eléctrica de los electrones que permanecen en la BV (que se denominará J_{resto}), analizaremos en primer lugar una situación que involucra a todos los electrones de la BV menos a uno. Tal como ya se señaló en el apartado 5.2, debemos notar que la corriente eléctrica de una banda totalmente llena es nula:

$$J_{\text{llena}} = 0.$$

Esta corriente puede a su vez descomponerse en la corriente, J_i , producida por un único electrón “*i*” situado en el *borde superior* de la BV más la producida por el resto de electrones de dicha banda, J_{resto} .



Es claro que esta última corriente describe la contribución de los electrones de la banda de valencia cuasillena, pudiéndose escribir como

$$\mathbf{J}_{\text{resto}} = \mathbf{J}_{\text{llena}} - \mathbf{J}_i = -\mathbf{J}_i ,$$

es decir, la corriente debida a todos los electrones de la BV menos el electrón i es equivalente a menos la corriente del electrón i situado en el borde superior de la BV. Dado que

$$\mathbf{J}_i = -e\mathbf{v}_i$$

y teniendo en cuenta que la velocidad, $\mathbf{v}_i$, puede escribirse, en analogía con la expresión (4.11), como

$$\mathbf{v}_i = \mathbf{a}_i\tau_i ,$$

encontramos que

$$\mathbf{J}_{\text{resto}} = e\mathbf{a}_i\tau_i . \quad (5.17)$$

Para obtener una idea más clara de la *naturaleza* de la corriente a la que es equivalente $\mathbf{J}_{\text{resto}}$ debe analizarse el sentido del vector aceleración $\mathbf{a}_i$. La aceleración podrá obtenerse a partir de la aplicación de la ley de Newton para el electrón *ligado* i , esto es,

$$\mathbf{a}_i = \frac{\mathbf{F}_{\text{externa}}}{m_i^*} = \frac{-e\mathcal{E}}{m_i^*} .$$

Ahora bien, dado que el electrón i estaba en el borde superior de la BV, su masa efectiva es *negativa*, $m_i^* = -|m_i^*| < 0$, por lo que encontramos que

$$\mathbf{a}_i = \frac{e\mathcal{E}}{|m_i^*|} . \quad (5.18)$$

La expresión anterior nos indica que la aceleración del electrón i del borde superior de la BV es equivalente a la de una pseudopartícula, que se llamará **huevo**, que tuviese carga positiva, e , y masa positiva $|m_i^*|$. El razonamiento anterior puede extenderse similarmente al caso de más de un electrón del borde superior de la BV. De acuerdo a esta consideración y a la expresión (5.17), se puede concluir que

la contribución a la corriente de todos los electrones de la BV menos un numero pequeño de ellos que migraron a BC es equivalente a la corriente del mismo número de huecos (pseudopartículas con carga y masa positiva)

Básicamente, lo que se ha conseguido con la anterior interpretación es encontrar una equivalencia entre la corriente de *muchos* electrones (obviamente con carga negativa) de una BV cuasillena con la corriente de unos *pocos* huecos de carga positiva. No obstante, debemos tener en cuenta que la corriente en el sólido está sostenida únicamente por electrones y que los huecos se han introducido con el único

objetivo de simplificar el análisis. En este sentido, el tratamiento de la corriente debido a los *huecos* en BV se hará de una forma análoga al de los electrones en la BC. Por ejemplo, si los electrones de la BV cuasillena son sometidos a un campo eléctrico externo, estos electrones ganarán energía provocando simultáneamente que los huecos se muevan hacia “abajo” en la banda. Dado que en el análisis de la BV cuasillena se ignoran los electrones y se tratan únicamente los huecos, esto implica que un incremento de la energía de los portadores de carga de la BV se traduce en que la energía de los huecos *decrece* desde el tope superior de la BV.

Hemos encontrado entonces que la corriente en un semiconductor a $T > 0\text{ K}$ en respuesta a un campo eléctrico externo, $\mathcal{E}$, está sostenida por dos tipos de portadores:

- **electrones en la Banda de Conducción, y**
- **huecos en la Banda de Valencia.**

En consecuencia, la densidad de corriente total, J , puede expresarse como la superposición de la corriente debida a los electrones en BC, J_n , más la corriente debida a los huecos en BV, J_p ,

$$J = J_n + J_p . \quad (5.19)$$

La distribución de estos dos tipos de portadores será por tanto lo que determinará las propiedades eléctricas de los semiconductores. Por este motivo, los temas siguientes dedicados al estudio de los semiconductores se centrarán en analizar el comportamiento de los electrones en la BC y los huecos en la BV.

5.5. Problemas propuestos

5.1: Responda a las siguientes cuestiones teóricas:

- ¿Cuáles son las diferencias más importantes entre un electrón *libre* y un electrón en el sólido cristalino?.
- ¿Por qué se originan bandas de energía en un sólido cristalino?
- ¿Son los huecos simplemente la ausencia de electrones en las bandas de energía?. En caso afirmativo, ¿cómo explicaría que, a pesar de la *ausencia* de muchos electrones en BC, no haya huecos en esta banda?
- ¿Se mueven los huecos en la misma dirección que los electrones?

5.2: Para una banda de energía que puede ser aproximada mediante la expresión

$$E(k) = E_0[1 - \exp(-2a^2k^2)]$$

(donde a es la constante de la red del cristal), calcule:

- a) La masa efectiva para $k = 0$.
- b) El valor de k para el que la velocidad del electrón es máxima.

Sol. a): $m^*(k=0) = \hbar^2 / (4a^2 E_0)$; **b):** $k = 1 / (2a)$.

5.3: El valor experimentalmente determinado de la energía de Fermi en el Na es de 2,50 eV. Usando la expresión teórica para la energía de Fermi y el valor experimental determine la masa efectiva de los electrones en el Na monovalente, cuyo peso atómico es 22.9 g/mol y su densidad 0.97 g/cm³.

Sol. $m^* = 1,26m_e$.

Capítulo 6

Bandas de Energía en Semiconductores

6.1. Introducción

El estudio teórico de los semiconductores fue realizado básicamente (Wilson, Shockley,...) en la década de los 30 del siglo XX. No obstante, el uso tecnológico de los semiconductores no se inició hasta unas dos décadas después debido, en gran parte, a la dificultad en la obtención de muestras puras de material semiconductor. Desde un punto de vista tecnológico, algunas de las características que hacen atractivos a los semiconductores pueden ser las siguientes:

- Aparición de dos tipos de portadores de carga: electrones (e^-) en BC y huecos (h^+) en BV. El hecho de que la conducción eléctrica se produzca por dos tipos de portadores ofrece una mayor flexibilidad de diseño y amplía considerablemente las posibilidades tecnológicas de estos materiales respecto a los conductores y/o aislantes.
- Las propiedades físicas de los semiconductores son altamente dependientes de la concentración de impurezas añadidas al material. Esto permite construir muestras de semiconductor con muy diversas características físicas, propiedad que puede ser eficazmente usada para el diseño de dispositivos electrónicos y optoelectrónicos.
- La mayoría de los componentes electrónicos y optoelectrónicos pueden realizarse sobre la misma muestra de semiconductor por lo que se pueden integrar en un mismo *chip* muchos dispositivos diferentes.

El interés práctico de los semiconductores se pone de manifiesto en su amplia utilización en la tecnología actual. Su uso es fundamental en

- Microelectrónica.

Prácticamente todos los elementos usados en Electrónica pueden realizarse usando materiales semiconductores de distinto tipo (por ejemplo: resistencias, diodos, transistores, puertas lógicas, etc) y, por tanto, pueden ser integrados conjuntamente en un mismo chip.

- Comunicaciones.

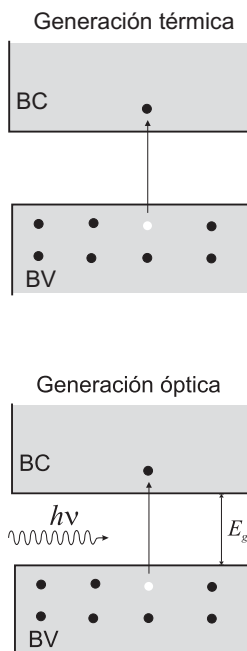
Los circuitos usados en los sistemas de comunicación (circuitos de baja y alta frecuencia) se realizan actualmente sobre substratos semiconductores.

- Optoelectrónica.

Dada la posibilidad de interacción de los semiconductores con la luz, muchos de los dispositivos ópticos y optoelectrónicos se realizan sobre la base de materiales semiconductores, por ejemplo: LED, láser de inyección, células fotovoltaicas, etc.

6.2. Generación y recombinación de electrones y huecos

Como ya se ha comentado anteriormente, la existencia de electrones en BC y huecos en BV es la característica física más determinante de las propiedades eléctricas de los semiconductores. En concreto, la existencia de estos electrones en BC y/o huecos en BV puede explicarse a partir de los siguientes procesos:



- **Generación/recombinación térmica de pares e^- / h^+ .**

Debido a los aportes energéticos de origen térmico ($T > 0\text{ K}$) existe cierta probabilidad de que, fruto de la excitación térmica, algunos electrones de BV pasen a la BC a través de la BP, generando así pares de e^- / h^+ .

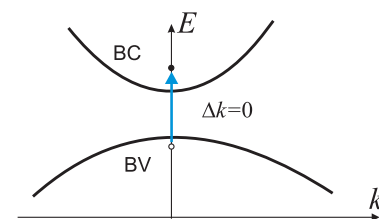
- **Generación óptica de pares e^- / h^+ .**

La posible interacción luz $\Leftrightarrow$ semiconductor se producirá cuando un fotón de energía $h\nu > E_g$ incida sobre el material. Un electrón de BV puede absorber entonces la energía suficiente para pasar a BC generando simultáneamente un hueco en la BV.

En la interacción luz $\Leftrightarrow$ semiconductor deben distinguirse dos tipos de transiciones: directas e indirectas. Estos dos tipos distintos de transiciones responden a la distinta configuración de las bandas de energía cuando se considera su estructura con un poco más de detalle; esto es, cuando se tiene en cuenta la dependencia de la forma de las bandas con respecto al número de ondas k .

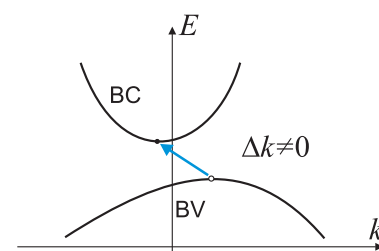
- TRANSICIONES DIRECTAS.

Este tipo de transiciones se da cuando el mínimo de la BC coincide, para el mismo valor de k (usualmente $k = 0$), con el máximo de la BV. Este hecho permite que pueda darse la mínima transición energética entre las dos bandas sin que haya un cambio en el momento lineal (debido a que k no varía). En este tipo de transiciones se absorbe un fotón simultáneamente a la transición electrónica entre bandas.



- TRANSICIONES INDIRECTAS.

En este caso, la forma de las bandas es tal que el mínimo de la BC y el máximo de la BV no ocurren para el mismo valor de k . Este hecho implica que una transición electrónica entre BV y BC debe llevar aparejado un proceso que dé cuenta del cambio de momento lineal necesario. En la práctica esto implica que el electrón debe primero realizar una transición hacia otro estado (usualmente un estado energético provocado por la presencia de algún defecto en la red) y desde ahí realizar la transición entre bandas sin intercambio de momento. En otras muchas transiciones indirectas, el proceso de cambio de momento suele deberse a un intercambio de calor con la red.



■ Adición de impurezas.

Si se añaden átomos de elementos que no estén en la columna IV (usualmente llamados impurezas sustitutorias), se produce un incremento de la concentración de electrones en BC y/o huecos en BV. La selección del tipo de impureza que se añade provocará un aumento considerable del número de e^- o bien de h^+ . Es interesante notar que este proceso de generación, al contrario que los anteriores, no genera *pares* de e^- / h^+ sino que sólo genera un tipo de portadores.

Cuando se añaden impurezas **NO** se generan directamente pares de e^- / h^+ sino e^- o h^+

Debemos observar que simultáneamente a la generación de e^- y h^+ ocurre un fenómeno de **recombinación** de pares e^- / h^+ . Este proceso de recombinación puede verse como un proceso inverso al de generación de pares e^- / h^+ ; es decir, existe cierta probabilidad de que un electrón de la BC pase a la BV, liberando así cierta energía en este tránsito en forma de calor que absorbe la red o bien en forma de luz (fotones). Si los agentes externos permanecen invariables en el tiempo, la actuación conjunta de la generación y la recombinación de electrones y huecos provoca que sus concentraciones permanezcan *constantes* en un *equilibrio dinámico*.

Un estudio de las causas que intervienen en la generación y recombinación de pares e^- / h^+ nos permitiría concluir que la velocidad de generación de pares e^- / h^+ , G , depende de la temperatura de operación y del proceso concreto que origina dicha generación, mientras que la velocidad de recombinación de estos pares, R , se encuentra que

Velocidad de recombinación de
pares e^- / h^+

es proporcional a la concentración existente tanto de electrones en BC, n , como de huecos en BV, p , es decir,

$$R = \alpha_r np, \quad (6.1)$$

donde el factor α_r es una constante de proporcionalidad que depende del material y del mecanismo particular de recombinación.

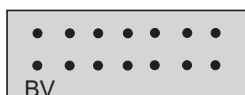
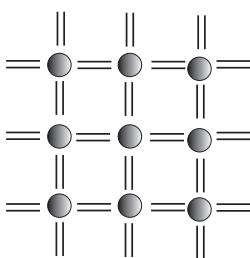
6.3. Semiconductores Intrínsecos

Cuando las propiedades eléctricas de un semiconductor vienen determinadas exclusivamente por la estructura de bandas del cristal decimos que este semiconductor es **intrínseco** (en la práctica, diremos que un semiconductor es intrínseco cuando la concentración de impurezas sea tan pequeña que no afecte a sus propiedades eléctricas). Una propiedad importante de estos semiconductores es que sus portadores de carga, pares e^- / h^+ , se generan únicamente por excitación térmica a través de la banda prohibida.

Para estudiar las propiedades de los semiconductores intrínsecos, llevaremos a cabo, en primer lugar, una descripción cualitativa de la aparición de electrones en BC y huecos en BV. Posteriormente estudiaremos la probabilidad de ocupación de estos portadores así como su función densidad de estados. Esto nos permitirá finalmente obtener la distribución energética de ambos portadores.

6.3.1. Descripción cualitativa

En función de un modelo bidimensional de enlaces covalentes y de la estructura de bandas, los semiconductores intrínsecos pueden describirse de la siguiente manera:



■ A $T = 0$ K.

Dado que la estructura reticular típica de los semiconductores es la *estructura tipo diamante* (ver Apartado 3.4), cada uno de los átomos del cristal aparece rodeado de cuatro vecinos próximos de manera que forma un doble enlace covalente con cada uno de ellos (cada átomo proporciona cuatro electrones) para obtener la configuración del octete. Esta configuración no deja ningún electrón fuera de los enlaces covalentes, por lo que el material se comporta como un aislante.

Desde el punto de vista del modelo de bandas, la anterior configuración se traduce en la presencia de una Banda de Valencia completamente llena y una Banda de Conducción completamente vacía separadas por una banda prohibida de anchura E_g .

■ A $T > 0\text{ K}$.

Debido a la agitación térmica, existe cierta probabilidad de que alguno de los enlaces covalentes del cristal pueda romperse dando lugar a un electrón que no está localizado en las inmediaciones de un átomo particular (está deslocalizado y *extendido* por la red por lo que puede funcionar como un portador de carga para conducir una corriente a través del cristal). A su vez, queda un enlace roto que puede ser ocupado por alguno de los electrones adyacentes provocando de esta manera otro posible movimiento adicional de cargas que puede identificarse con la aparición de un hueco¹.

Desde el punto de vista del modelo de bandas, la aparición del par e^-/h^+ es simplemente fruto de la posible transición térmica de un electrón de BV a BC.

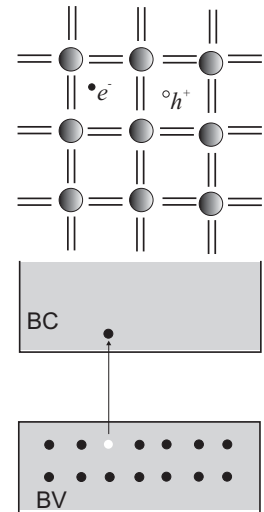
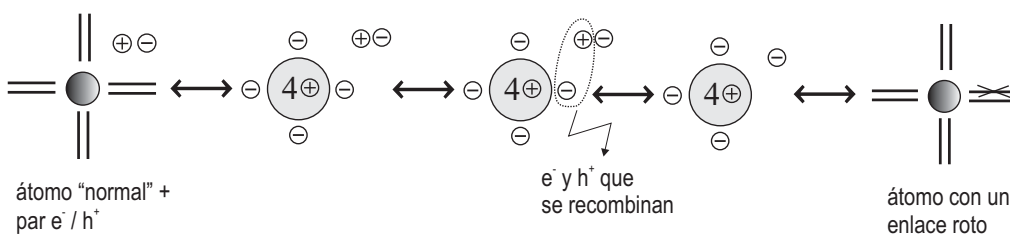
Dado que los electrones y huecos son generados térmicamente por parejas, la concentración de electrones en BC debe ser igual a la concentración de huecos en BV:

$$n = p \equiv n_i . \quad (6.2)$$

Por otra parte, dado que en equilibrio la concentración de electrones y/o huecos permanece constante, esto implica que la generación térmica de pares e^-/h^+ es compensada por continuas transiciones (directas o indirectas) de electrones de BC a BV, es decir, por una continua recombinación. El equilibrio requiere, por tanto, que en el semiconductor intrínseco la velocidad de generación térmica, G_i , de pares e^-/h^+ sea igual a la velocidad de recombinación, R_i , de estos pares y por tanto tendremos que

$$R_i = G_i . \quad (6.3)$$

¹Tal como muestra la figura adjunta, la aparición de un par e^-/h^+ en la red podría también considerarse teniendo en cuenta que, en dicha red, un átomo con un enlace roto puede verse como un átomo “normal” más un par e^-/h^+ . Para visualizar esto, consideremos que cada átomo de la red contribuye a los enlaces con cuatro de sus electrones y, en este sentido, caractericemos cada átomo por sus cuatro electrones de valencia junto con sus correspondientes cuatro protones que den cuenta de la neutralidad de la carga en el átomo. En este sentido, un átomo “normal” más un par e^-/h^+ , tras la posible recombinación de uno de los electrones ligados al átomo con el hueco, sería equivalente al átomo con uno de sus enlaces rotos.



Concentración de e^- y h^+ es la misma en un semiconductor intrínseco

6.3.2. Probabilidad de ocupación de electrones y huecos

La generación térmica de pares e^-/h^+ puede entenderse a partir de la forma de la función distribución de Fermi-Dirac, que da la probabilidad de ocupación de los estados electrónicos. En concreto para $T > 0\text{ K}$, la probabilidad de ocupación de electrones, $f_n(E)$, es la ya conocida y estudiada con detalle en el Tema 4, esto es,

$$f_n(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right) + 1}. \quad (6.4)$$

Para el caso de la probabilidad de ocupación de huecos, $f_p(E)$, debe notarse que la cantidad $1 - f_n(E)$ representa la probabilidad de que un estado electrónico de energía E esté vacío, o dicho de otra manera, la probabilidad de que este estado esté ocupado por un hueco. Por tanto,

$$f_p(E) = 1 - f_n(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E_F - E}{k_B T}\right) + 1}, \quad (6.5)$$

representa la probabilidad de ocupación de huecos².

6.3.3. Posición del nivel de Fermi para semiconductores intrínsecos

Dado que en un semiconductor intrínseco debe cumplirse que la concentración de electrones en BC sea idéntica a la concentración de huecos en BV ($n = p$), es razonable suponer que esta situación se da si

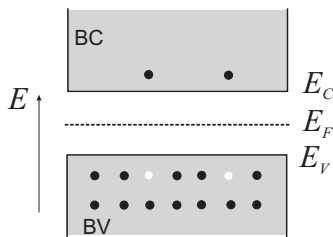
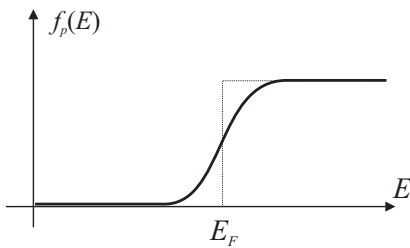
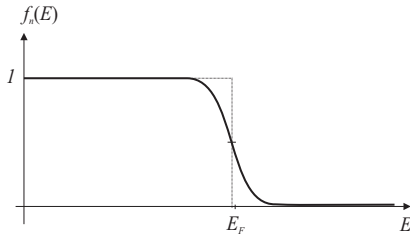
el nivel de energía de Fermi, E_F , se sitúa aproximadamente en el medio de la Banda Prohibida.

De esta manera se tiene que la probabilidad de ocupación de electrones en BC será exactamente la misma que la probabilidad de ocupación de huecos en BV. Si la densidad de estados para electrones en BC y huecos en BV no es muy distinta, el situar E_F en mitad de la BP provocará que la concentración de electrones en BC sea igual a la concentración de huecos en BV, tal y como se espera para el semiconductor intrínseco.

6.3.4. Función densidad de estados para electrones y huecos

La función densidad de estados para *electrones libres* se obtuvo ya en (4.17), aunque si estamos interesados en la función densidad de

²Es importante observar que la probabilidad de ocupación de huecos se obtiene como una reflexión especular en torno a E_F de la probabilidad de ocupación de electrones.



estados *por unidad de volumen* , entonces encontraremos que

$$g(E) = \frac{(2m_e)^{3/2}}{2\hbar^3\pi^2} E^{1/2},$$

siendo su forma gráfica la mostrada en la Fig. 6.1. Debe notarse que el origen de la energía cinética, $E \equiv E_c$, para los electrones libres se tomaba en el fondo del pozo de potencial.

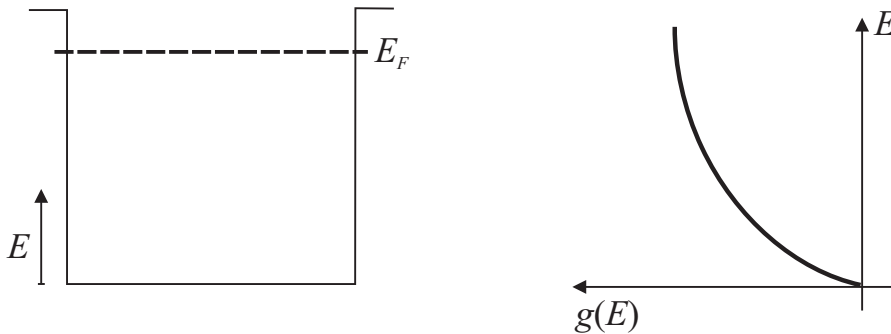


FIGURA 6.1: Función densidad de estados para electrones libres en un metal.

Si ahora se desea obtener la función densidad de estados para los electrones en BC y para los huecos en BV debemos tener en cuenta que, de acuerdo a la discusión que se llevó a cabo en el apartado 5.3, el tratamiento de los electrones / huecos en BC / BV es análogo al de los electrones libres en el modelo de Sommerfeld pero considerando que las partículas están dotadas ahora de cierta *masa efectiva*, m_e^* para los electrones y m_h^* para los huecos.

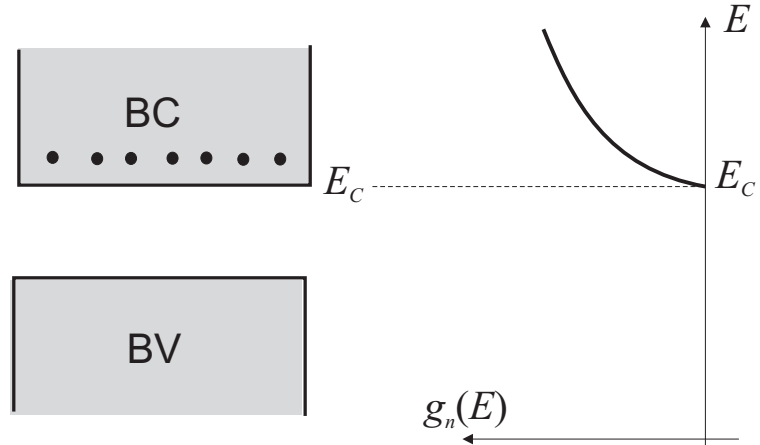
Electrones en Banda de Conducción

Los electrones en la banda de conducción se comportarán de forma análoga a los electrones libres en el pozo finito del modelo de Sommerfeld salvo que ahora debemos considerar que

- La masa debe ser modificada para dar cuenta de la posición en la banda, esto es, debemos sustituir la masa de los electrones, m_e , por su masa efectiva, m_e^* .
- El origen de energía cinética debe ser tomado ahora en el límite inferior de la BC, cuyo valor se denotará como E_C , para poder así dar cuenta de que un electrón en el fondo del pozo formada por la BC tenga ahí su nivel de energía cero.

De acuerdo a lo anterior, la función densidad de estados para los electrones en la BC, $g_n(E)$, vendrá dada por

$$g_n(E) = \frac{(2m_e^*)^{3/2}}{2\hbar^3\pi^2} (E - E_C)^{1/2} \quad (6.6)$$

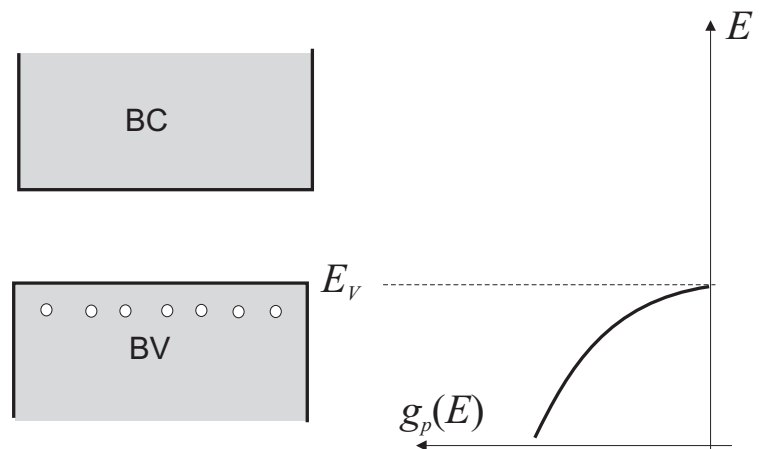


Huecos en Banda de Valencia

Análogamente al caso de los electrones en BC, la densidad de huecos en BV, $g_p(E)$, viene dada por

$$g_p(E) = \frac{(2m_h^*)^{3/2}}{2\hbar^3\pi^2} (E_V - E)^{1/2}, \quad (6.7)$$

donde el origen de energía cinética nula ha de tomarse en el borde superior de BV, $E \equiv E_V$ y teniendo en cuenta además que el *sentido positivo de esta energía debe tomarse en sentido decreciente*.



6.3.5. Distribución energética de huecos y electrones

La obtención de la distribución energética de electrones en BC, dn/dE , y huecos en BV, dp/dE , se hará a partir de las expresiones anteriores para la densidad de estados y la probabilidad de ocupación, dando lugar a

$$\frac{dn}{dE} = g_n(E) f_n(E) = C_n \frac{(E - E_C)^{1/2}}{\exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right) + 1}, \quad (6.8)$$

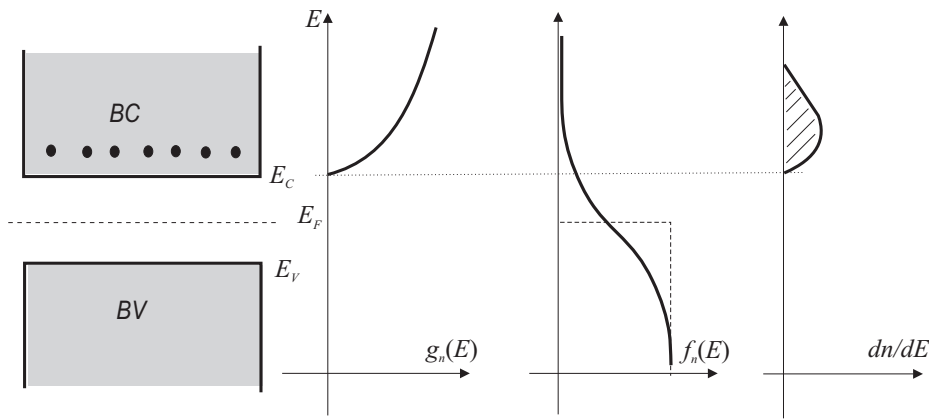


FIGURA 6.2: Distribución energética de e^- en BC para un semiconductor intrínseco

$$\frac{dp}{dE} = g_p(E) f_p(E) = C_p \frac{(E_V - E)^{1/2}}{\exp\left(\frac{E_F - E}{k_B T}\right) + 1}. \quad (6.9)$$

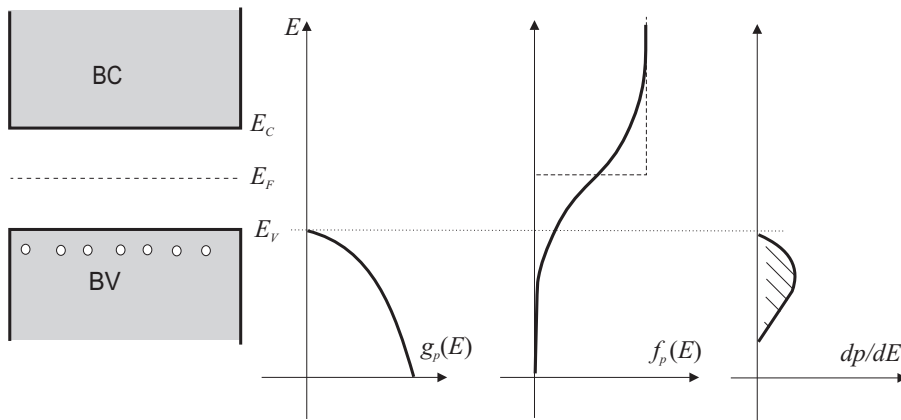


FIGURA 6.3: Distribución energética de h^+ en BV para un semiconductor intrínseco

La Fig. 6.4 muestra una representación gráfica de la distribución de huecos y electrones de un semiconductor comparándolas con las de un metal y un aislante. En esta figura podemos ver cómo la concentración de electrones en los metales es la más abundante. Igualmente observamos que la diferencia básica entre los aislantes y los semiconductores proviene de la diferente anchura de la BP, lo cual provoca que, a una temperatura dada, la distribución de electrones y huecos sea más abundante en los semiconductores que en los aislantes.

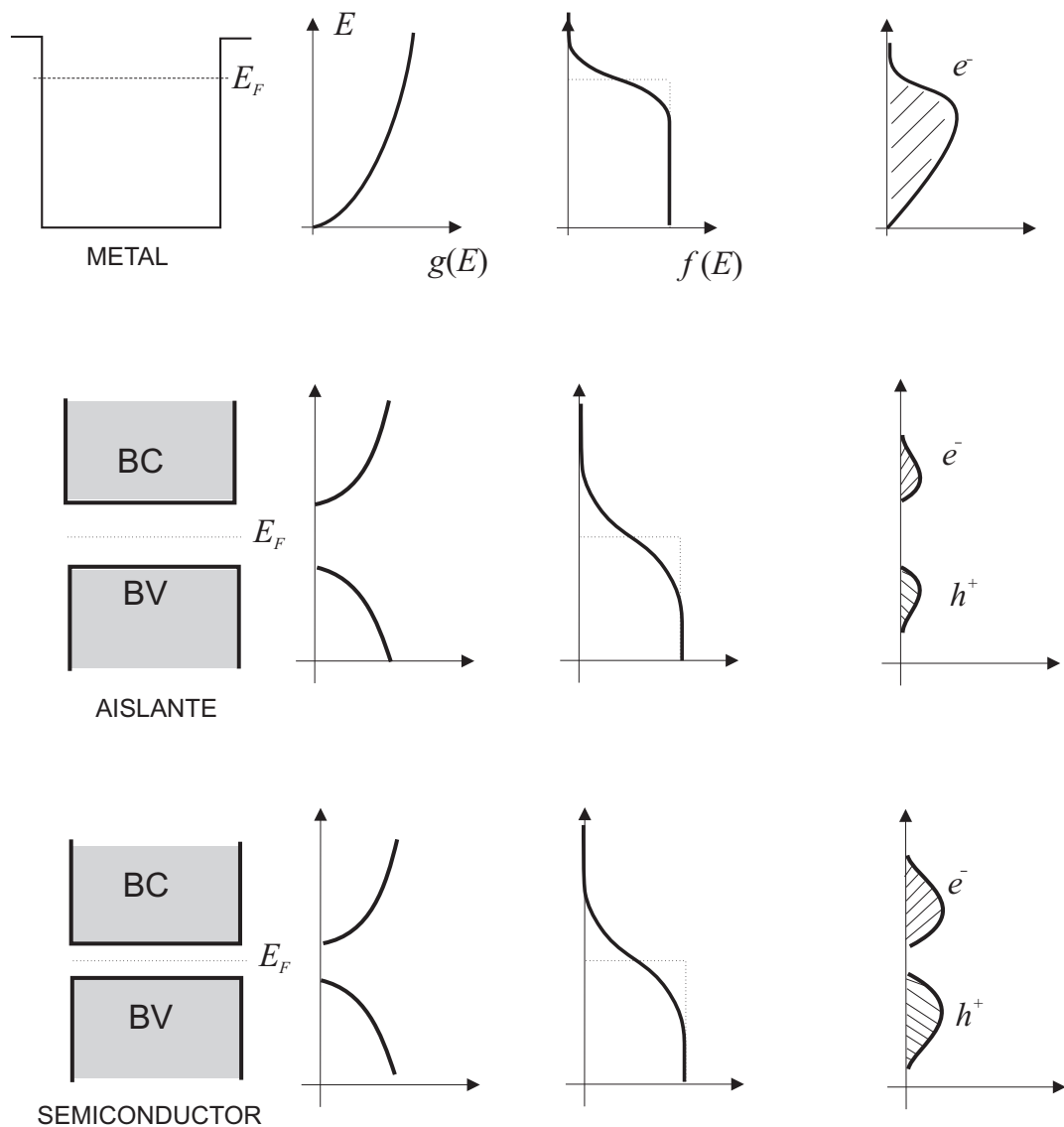


FIGURA 6.4: Distribución de electrones, dn/dE , y huecos, dp/dE , en metales, aislantes y semiconductores

6.4. Semiconductores Extrínsecos

Además de los portadores intrínsecos generados térmicamente, es posible crear nuevos portadores en los semiconductores mediante la adición de impurezas en el cristal. Este proceso, llamado dopaje, es una técnica muy común para variar la conductividad de los semiconductores. Si el número de átomos de impurezas que se añaden es una fracción pequeña del número total de átomos originarios en el cristal, entonces puede suponerse que la acción de la adición de estas impurezas será la de sustituir a algunos átomos originales pero SIN cambiar la estructura reticular del cristal, es decir, sin modificar apreciablemente la estructura de bandas del semiconductor. Según el tipo de impurezas que se añadan al cristal, se distinguirán dos tipos de semiconductores extrínsecos.

6.4.1. Semiconductor tipo *n*

Si las impurezas que se añaden al cristal semiconductor pertenecen a elementos de la columna V (N, P, As, Sb), entonces, según la visión bidimensional de enlaces del cristal, algunas posiciones ocupadas por átomos originales aparecerán ahora ocupadas por los N_D átomos de impurezas añadidas, que debido a sus cinco electrones de valencia posibilitarán el que uno de esos electrones no esté ubicado en alguno de los enlaces covalentes. Dado que este electrón está ligado al átomo de impureza por fuerzas electrostáticas débiles, dicho átomo puede fácilmente ionizarse y el e^- liberado podrá contribuir a la corriente eléctrica en el cristal. A las impurezas del grupo V se las llamará **impurezas donadoras**.

Desde el punto de vista del modelo de bandas, y tal como muestra la Fig. 6.5, la situación anterior se traduce en la aparición en la BP

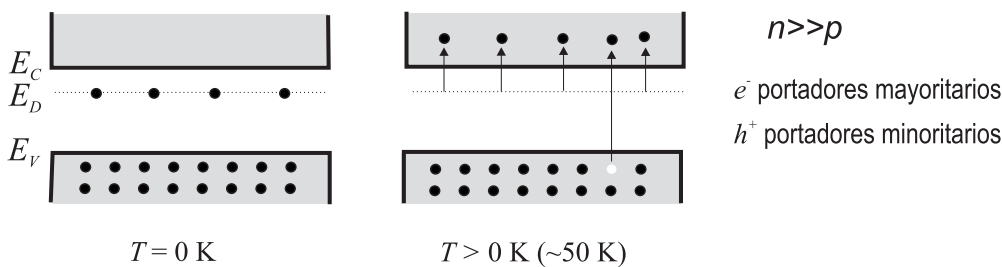
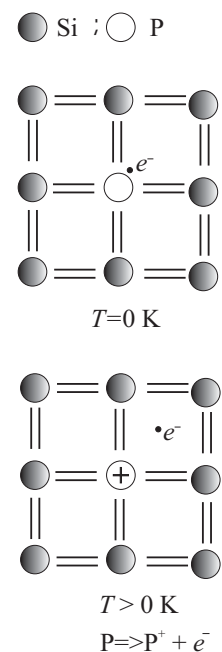


FIGURA 6.5: Estructura de bandas de un semiconductor dopado con impurezas donadoras. A bajas temperaturas, el número de transiciones de electrones a la BC se debe principalmente a la presencia de los átomos donadores (ocurren pocas transiciones de origen térmico).

de un nuevo nivel de energía, E_D , (con $2N_D$ estados posibles) correspondiente a los electrones deslocalizados de los átomos de impurezas donadoras. Este nivel de energía aparecerá cercano al borde inferior de la BC y así, por excitación térmica, existirá una alta probabilidad

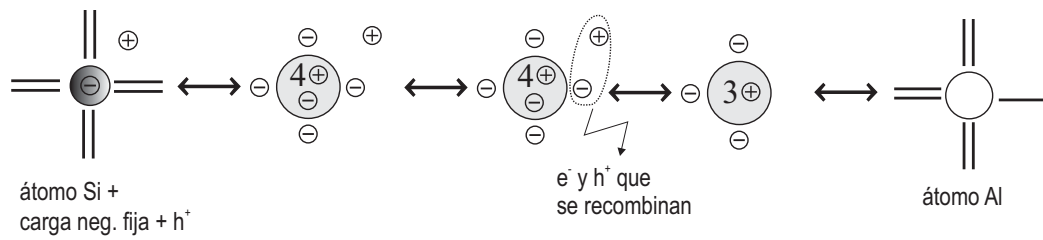
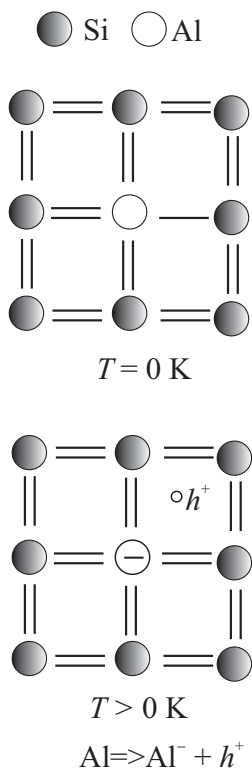


FIGURA 6.6:

de que los electrones de este estado pasen a la BC y, por tanto, incrementen la concentración de electrones en dicha banda. Debe notarse que el aumento de electrones en esta banda no va acompañado de un incremento análogo de huecos en BV dado que la correspondiente carga positiva corresponde al ion de la impureza donadora permanecerá fijo en el cristal.

La discusión anterior también nos permite predecir cualitativamente que la posición del nivel de Fermi a $T = 0\text{ K}$ debe estar situada entre E_D y E_C , puesto que así aseguraríamos que a 0 K no hay electrones en BC y el nivel $E = E_D$ está lleno.



6.4.2. Semiconductor tipo p

De manera similar a lo que sucede para el semiconductor tipo *n*, la adición de átomos de elementos correspondientes a la columna III (Ga, In, B, Al) con sólo tres electrones de valencia provoca que al sustituir a alguno de los átomos originales del cristal semiconductor, uno de los enlaces covalentes quede incompleto. Este enlace incompleto puede ser fácilmente completado por uno de los electrones de los enlaces adyacentes provocando de este modo que el enlace incompleto pueda “vagar” por el cristal y contribuya a la corriente eléctrica como un hueco.

Tal como muestra la Fig. 6.6, la adición de un átomo de Al a la red del Si podría visualizarse como una red típica de Si más una carga negativa *fija* en la posición del átomo de Al y una carga positiva (hueco) débilmente ligada a la carga negativa. Una débil excitación térmica puede “liberar” a esta carga positiva creando así un portador móvil de carga.

Dado que los átomos de impurezas (en número igual a N_A) pueden aceptar electrones de átomos adyacentes, éstas se denominan **impurezas aceptoras**.

La situación que el modelo de bandas (ver Fig. 6.7) predice para el presente caso consiste en la aparición de un nuevo nivel de energía, E_A en la BP (con $2N_A$ estados electrónicos posibles) correspondiente a los electrones que pueden ser aceptados por las impurezas. Este nivel

de energía estará situado cerca del borde superior de la BV, indicando que este nivel será fácilmente alcanzado por los electrones del borde

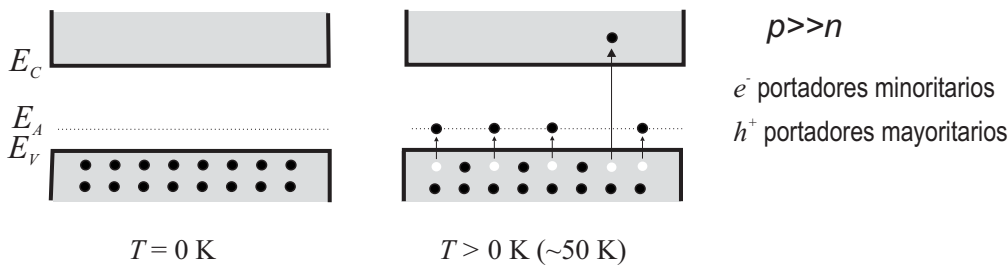


FIGURA 6.7: Estructura de bandas de un semiconductor dopado con impurezas aceptoras.

superior de la BV dejando de este modo un número igual de huecos en la BV.

Análogamente al caso del semiconductor tipo n , la posición del nivel de Fermi a $T = 0 \text{ K}$ debe estar situada entre E_V y E_A .

6.4.3. Distribución energética de huecos y electrones

Para obtener la distribución energética de huecos/electrones en BC/BV han de obtenerse los productos (6.8) y (6.9). Debe notarse que dado que se supuso que la adición de impurezas no modificaba la estructura de las bandas energéticas del cristal, las densidades de estados, $g_n(E)$ y $g_p(E)$ (dadas por (6.6) y (6.7)), no variarán por la adición de impurezas donadoras/aceptoras. El cambio en la distribución energética debido a la aparición de nuevos portadores debe venir por tanto reflejado en la probabilidad de ocupación de los estados.

Para un semiconductor tipo n existe claramente una mayor concentración de electrones en BC que de huecos en BV. Para que esto pueda ocurrir, el nivel de Fermi correspondiente a la presente situación debe situarse *por encima* de la posición del nivel intrínseco. Dado que $f_n(E)$ mantiene su forma relativa para una temperatura específica, el desplazamiento del nivel de Fermi indica que la probabilidad de ocupación de electrones en BC ($E \geq E_C$) será mayor que la probabilidad de ocupación de huecos en BV ($E \leq E_V$).³

Para un semiconductor tipo p , la concentración de huecos en BV será mayor que la de electrones en BC. Por tanto, el nivel de Fermi (siguiendo los razonamientos dados anteriormente) deberá situarse *por debajo* de la posición del nivel intrínseco.

A partir de las discusiones anteriores, la distribución energética

³Se espera que la concentración de huecos disminuya debido a los fenómenos de recombinación. Al aumentar considerablemente n , y de acuerdo con (6.1), la velocidad de recombinación de pares e^-/h^+ aumentará, lo que tendrá poco efecto sobre el número total de electrones en BC pero sí será bastante considerable sobre el número de huecos en BV.

para electrones en BC y huecos en BV para semiconductores tipo n y tipo p tendrá la forma mostrada en la Fig. 6.8, donde también se muestra comparativamente la de un semiconductor intrínseco.

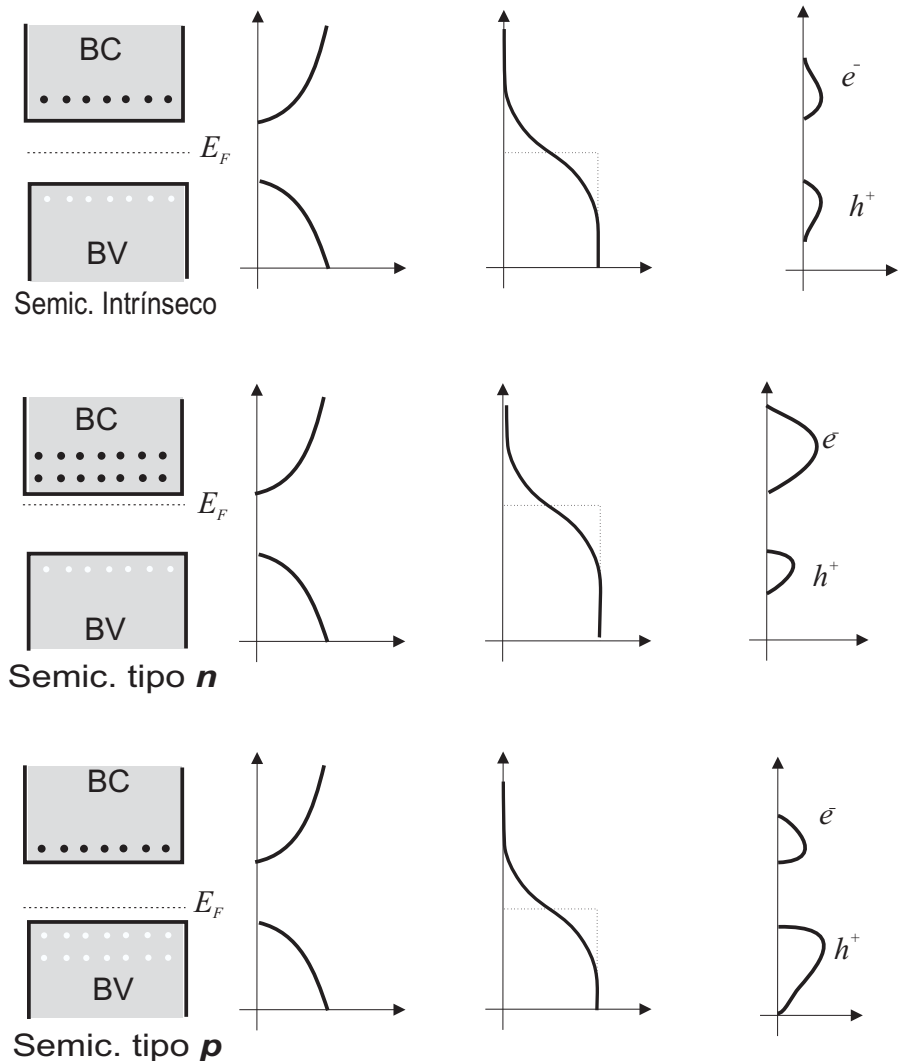


FIGURA 6.8: Distribución de electrones, dn/dE , y huecos, dp/dE , en semiconductores intrínsecos, tipo n y tipo p .

6.5. Problemas propuestos

6.1: Las bandas prohibidas para el Si y el Ge son respectivamente 1.1 eV y 0.7 eV. Calcular la frecuencia mínima que debe tener una radiación electromagnética para poder producir conductividad en estos semiconductores.

Sol. Si $\nu = 2,66 \times 10^{14}$ Hz. Ge $\nu = 1,69 \times 10^{14}$ Hz.

6.2: Cuando un fotón de energía $E \gg E_g$ penetra en un semiconductor produce pares electrón/hueco (e/h), esto es, se excitan electrones desde el borde de la BV hasta el fondo de la BC. Un cristal de Ge ($E_g = 0,67$ eV) se usa como detector de rayos γ (fotones de alta energía). Determinar: **a)** ¿cuál es el número máximo, N , de pares e/h

que puede producir una radiación γ de 1.5 MeV?; **b)** si la resolución del detector es de $\pm 4 \times 10^3$ pares e/h, ¿cuál es la resolución de la energía óptima del detector?

Sol. (a) $N = 2,238 \times 10^6$, (b) $E = 2,68 \times 10^3$ eV.

6.3: La luz visible del espectro está compuesta por fotones con longitudes de onda comprendidas entre 4000 Å y 7000 Å (equivalente a energías entre 1.8 y 3.1 eV). Para el diamante el ancho de la BP es de 6 eV. Explicar por qué el diamante es transparente. Asimismo, explicar por qué el Si cuya BP es de 1.1 eV es transparente al infrarrojo (IR) de frecuencia comprendida entre 10^{12} y 10^{14} Hz y no lo es a la radiación visible.

6.4: Suponer que la energía de Fermi de un semiconductor intrínseco está en mitad de su banda de energía prohibida y que la anchura de ésta es grande en comparación con kT . Demostrar que la probabilidad de ocupación de un estado de energía E está dada aproximadamente por **a)** $f_n(E) = e^{-(E-E_F)/kT}$ para un electrón en la banda de conducción y **b)** $f_p(E) = 1 - f_n(E) = e^{-(E_F-E)/kT}$ para un hueco en la banda de valencia.

6.5: El GaAs es un semiconductor con una banda prohibida (BP), $E_g = 1,43$ eV. Dentro de esta BP aparecen niveles de energía debidos a impurezas. Medidos respecto a la BV estos niveles están a 0.05 eV para el Al y 1.38 para el P. ¿Cuál de estas impurezas actúa como donadora y cuál como aceptora?. Razone la respuesta.

Capítulo 7

Portadores de carga en Semiconductores

7.1. Introducción

Tal como se ha venido señalado, las propiedades eléctricas de los semiconductores vienen básicamente determinadas por la presencia de electrones en la BC y de huecos en la BV (dado que son estos portadores de carga los que determinen el flujo de corriente eléctrica en el material). Por este motivo, este tema estará dedicado al estudio de las propiedades de estos portadores de carga. En particular estudiaremos en primer lugar cuántos portadores hay para poder así determinar los factores que influyen en la conductividad eléctrica del semiconductor. Posteriormente estudiaremos la respuesta de un semiconductor al efecto de un campo externo, para lo cual analizaremos los distintos tipos de corriente que aparecen y dedicaremos una especial atención a un nuevo tipo de corriente (corriente de difusión) que surge fruto de una concentración no uniforme de portadores. Finalmente obtendremos las ecuaciones que determinan la distribución espacial de portadores en algunas situaciones de gran interés práctico.

7.2. Concentración de electrones y huecos

En el Tema 4 ya apuntamos que la conductividad eléctrica de un semiconductor podía escribirse como

$$\sigma = e(n\mu_n + p\mu_p) , \quad (7.1)$$

donde μ_n y μ_p son las movilidades de los electrones y huecos respectivamente. Es interesante notar que las movilidades dependen inversamente de la masa efectiva. Por ejemplo para electrones en BC, analogía con la expresión (4.12) para electrones libres en metales, se

tiene que

$$J_n = \frac{ne^2\tau_n}{m_e^*} \mathcal{E}$$

(donde se ha usado la masa efectiva en vez de la masa en reposo), por lo que

$$\sigma_n = \frac{ne^2\tau_n}{m_e^*},$$

y dado que $\sigma_n = en\mu_n$, encontramos finalmente que

$$\mu_n = \frac{e\tau_n}{m_e^*}. \quad (7.2)$$

El procedimiento para obtener las concentraciones de electrones en BC, n , y huecos en BV, p , consiste en integrar las expresiones (6.8) y (6.9) con respecto a la energía en las correspondientes bandas. Así, para el caso de la concentración de electrones en BC tendremos que

$$n = \int_{BC} \frac{dn}{dE} dE = \int_{BC} g_n(E) f_n(E) dE. \quad (7.3)$$

Al sustituir las expresiones matemáticas encontradas en el tema anterior para $g_n(E)$ y $f_n(E)$, la integral (7.3) (así como su equivalente para el cálculo de p) presenta una forma para la que no es posible encontrar su primitiva en forma cerrada. Para intentar solventar este inconveniente, podemos hacer uso del hecho de que, en muchas situaciones típicas (para temperaturas no excesivamente altas y siempre que la concentración de impurezas que se añadan sea una fracción del número de átomos originales del cristal), la posición del nivel de Fermi está situada por debajo de E_C (o bien arriba de E_V para huecos en BV) al menos unas cuantas unidades de $k_B T$. Cuando se dan estas condiciones, es decir, si

$$E_C - E_F \gg k_B T \quad (7.4a)$$

$$E_F - E_V \gg k_B T, \quad (7.4b)$$

se dice que el semiconductor es **no degenerado**. Este hecho nos permite usar la siguiente expresión aproximada para la probabilidad de ocupación de electrones en BC:

$$f_n(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right) + 1} \approx \exp\left(-\frac{E - E_F}{k_B T}\right) \Big|_{E \geq E_C}. \quad (7.5)$$

Nótese que la anterior expresión aproximada de la función distribución de Fermi-Dirac tiene la misma forma que la función distribución de Maxwell-Boltzmann, tal como ya se discutió en (4.20). Dado que $f_n(E)$ decae exponencialmente a cero para valores de energía alejados de E_C ($E \gg E_C$), el límite de integración superior de la BC puede sustituirse por infinito, de modo que la concentración de electrones puede obtenerse con buena aproximación como

$$n = \int_{E_C}^{\infty} C_n (E - E_C)^{1/2} \exp\left(-\frac{E - E_F}{k_B T}\right) dE. \quad (7.6)$$

Condiciones de un conductor
no degenerado

Realizando el cambio de variable

$$x = \frac{E - E_C}{k_B T},$$

la integral (7.6) puede reescribirse como

$$n = C_n (k_B T)^{3/2} \exp\left(-\frac{E_C - E_F}{k_B T}\right) \int_0^\infty x^{1/2} e^{-x} dx.$$

Teniendo ahora en cuenta que la integral que aparece en la expresión anterior está tabulada y que su valor es $\sqrt{\pi}/2$, encontramos finalmente que el número de electrones por unidad de volumen en la BC puede expresarse como

$$n = N_C \exp\left(-\frac{E_C - E_F}{k_B T}\right), \quad (7.7)$$

Concentración de electrones en BC

donde N_C es una constante del semiconductor llamada *densidad efectiva de estados en BC* que viene dada por

$$N_C = 2 \left(\frac{m_e^* k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2}. \quad (7.8)$$

Un cálculo para la densidad efectiva de estados en BC para el Si a $T = 300$ K muestra que $N_C = 4,39 \times 10^{24} \text{ m}^{-3}$.

Siguiendo un procedimiento similar para el cálculo de la concentración de huecos en BV obtendríamos que

$$p = N_V \exp\left(-\frac{E_F - E_V}{k_B T}\right) \quad (7.9)$$

Concentración de huecos en BV

donde N_V es la *densidad efectiva de estados en BV* dada por

$$N_V = 2 \left(\frac{m_h^* k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2}. \quad (7.10)$$

En el Si a $T = 300$ K, $N_V = 5,95 \times 10^{24} \text{ m}^{-3}$.

Una expresión alternativa bastante útil para calcular la densidad efectiva de estados es

$$N_{C,V} = 2,5 \left(\frac{m_{e,h}^*}{m_e} \right)^{3/2} \left(\frac{T(\text{K})}{300} \right)^{3/2} \times 10^{25} \text{ m}^{-3}. \quad (7.11)$$

Es interesante notar que las expresiones obtenidas para n y p en (7.7) y (7.9) son válidas tanto para semiconductores intrínsecos como extrínsecos en equilibrio térmico y que su cálculo requiere el conocimiento previo de la posición del nivel de Fermi. De hecho puede observarse que a medida que E_F se aleja de $E_C(E_V)$ la concentración de electrones(huecos) decrece exponencialmente.

A partir de la posición del nivel de Fermi para el semiconductor intrínseco, que será denotado como E_i , pueden obtenerse unas expresiones útiles para el cálculo de las concentraciones de electrones y huecos en semiconductores extrínsecos conociendo la posición del nivel de Fermi y el valor de la concentración intrínseca, n_i . Teniendo en cuenta que, para semiconductores intrínsecos, las expresiones (7.7) y (7.9) nos dicen que

$$n_i = N_C \exp\left(-\frac{E_C - E_i}{k_B T}\right), \quad p_i = N_V \exp\left(-\frac{E_i - E_V}{k_B T}\right),$$

al sustituir estas expresiones de nuevo en (7.7) y (7.9), obtendremos equivalentemente que

$$n = n_i \exp\left(\frac{E_F - E_i}{k_B T}\right) \quad (7.12)$$

$$p = n_i \exp\left(\frac{E_i - E_F}{k_B T}\right). \quad (7.13)$$

7.2.1. Ley de acción masas

Otro resultado interesante que puede derivarse de las expresiones (7.7) y (7.9) se obtiene al realizar el producto de los valores de la concentración de electrones en BC por la concentración de huecos en BV. Si se realiza este producto tenemos que

$$\begin{aligned} np &= N_C \exp\left(-\frac{E_C - E_F}{k_B T}\right) N_V \exp\left(-\frac{E_F - E_V}{k_B T}\right) \\ &= N_C N_V \exp\left(-\frac{E_g}{k_B T}\right) = \text{Cte}(T; m^*, E_g), \end{aligned} \quad (7.14)$$

esto es, el producto np sólo depende de la temperatura y de ciertos parámetros del semiconductor (masas efectivas de electrones/huecos y la anchura de la BP). El resultado (7.14) nos dice entonces que a una temperatura fija, en un mismo semiconductor, el producto de la concentración de e^- en BC por la de h^+ en BV permanece constante independientemente del tipo y grado de dopaje del material.

El resultado anterior puede también obtenerse a partir de la combinación de las expresiones (7.12) y (7.13), de donde obtendríamos al multiplicarlas que

Ley de acción de masas

$$np = n_i^2. \quad (7.15)$$

Esta ley conocida como **ley de acción de masas** muestra que el producto de la concentración de electrones en BC por huecos en BV para cualquier semiconductor es siempre igual al cuadrado de la concentración intrínseca de electrones y/o huecos.

El valor de n_i puede a su vez relacionarse con los parámetros del semiconductor intrínseco combinando (7.14) con (7.15) para obtener

$$n_i = \sqrt{N_C N_V} \exp\left(-\frac{E_g}{2k_B T}\right). \quad (7.16)$$

Concentración de e^- y h^+ en un semiconductor intrínseco

La expresión anterior es a menudo también útil para obtener el valor de la anchura de la BP (E_g) a partir de los valores de n_i , N_C y N_V .

EJEMPLO 7.1 Cálculo de la concentración intrínseca en una muestra de Si a $T = 300$ K, siendo $m_e^* = 0,31m_e$, $m_h^* = 0,38m_e$, $E_g = 1,1$ eV.

Usaremos la expresión (7.16), para lo cual necesitamos previamente calcular N_C y N_V mediante (7.11). Operando obtenemos que

$$N_C = 2,5 \times 0,31^{3/2} \times 10^{25} \text{ m}^{-3} = 4,39 \times 10^{24} \text{ m}^{-3}$$

$$N_V = 2,5 \times 0,38^{3/2} \times 10^{25} \text{ m}^{-3} = 5,95 \times 10^{24} \text{ m}^{-3},$$

que al sustituirlos en (7.16) nos dice que

$$n_i = \sqrt{4,39 \times 5,95} \times 10^{24} \times \exp\left(-\frac{1,1 \times 40}{2}\right) \approx 1,42 \times 10^{15} \text{ m}^{-3},$$

donde hemos hecho uso de que, a temperatura ambiente, $k_B T \approx 1/40$ eV.

En el apartado 5.2 se discutió que la anchura de la BP, E_g , determinaba el que un sólido fuese considerado aislante o bien semiconductor. La expresión (7.16) muestra que la concentración de electrones en la BC decrece exponencialmente al aumentar E_g , justificando claramente porqué el diamante ($E_g \approx 6$ eV) es un buen aislante y sin embargo el Si ($E_g \approx 1$ eV) es un semiconductor.

EJEMPLO 7.2 Comparación de la concentración intrínseca, n_i , para el diamante (C) y el silicio (Si) a temperatura ambiente.

A partir de la expresión (7.16) puede verse que la relación entre la concentración de electrones en BC para el diamante y el silicio puede escribirse como

$$\frac{n_i(\text{C})}{n_i(\text{Si})} = \frac{\sqrt{N_C N_V}|_{\text{C}} \exp\left(-\frac{E_g(\text{C})}{2k_B T}\right)}{\sqrt{N_C N_V}|_{\text{Si}} \exp\left(-\frac{E_g(\text{Si})}{2k_B T}\right)}.$$

Despreciando las posibles pequeñas diferencias existentes respecto a las masas efectivas en el diamante y en el silicio obtenemos que

$$\frac{n_i(\text{C})}{n_i(\text{Si})} \approx \frac{\exp\left(-\frac{6 \text{ (eV)}}{2k_B T}\right)}{\exp\left(-\frac{1 \text{ (eV)}}{2k_B T}\right)} = \exp\left(-\frac{2,5 \text{ (eV)}}{k_B T}\right).$$

Dado que a temperatura ambiente $k_B T \approx 0,025 \text{ eV}$, encontramos finalmente que

$$\frac{n_i(\text{C})}{n_i(\text{Si})} = \exp\left(-\frac{2,5 \text{ (eV)}}{0,025 \text{ (eV)}}\right) = \exp(-100) \approx 10^{-44} \quad !!.$$

En el ejemplo 7.1 hemos obtenido que $n_i(\text{Si}) \approx 10^{15} \text{ m}^{-3}$ y dado que la densidad de electrones en BC para el diamante es 44 órdenes de magnitud menor que en el silicio, podemos concluir que $n_i(\text{C})$ es prácticamente nula; confirmando así que el diamante es un aislante excelente.

7.3. Compensación y Neutralidad de la carga espacial

Según se ha discutido en el Tema 6, en un semiconductor aparecen dos tipos distintos de cargas en función de su estado de movimiento, a saber,

- **Portadores móviles de carga:** las cargas *móviles* compuestas por los electrones de BC, n , y los huecos de BV, p .
- **Cargas fijas:** provenientes de la ionización de las impurezas sustitutorias tanto donadoras, N_{D+} , como aceptoras, N_{A-} .

Dado que ni la generación de pares e^- / h^+ ni la adición de impurezas provoca la aparición de carga *neta* y supuesto que el semiconductor era originalmente neutro, de acuerdo al principio de conservación de la carga, debemos tener que

$$\text{Número de cargas positivas} = \text{Número de cargas negativas}.$$

En otras palabras, la concentración de e^- en BC más la concentración de impurezas aceptoras ionizadas negativamente debe ser igual a la concentración de h^+ en BV más la concentración de impurezas donadoras ionizadas positivamente, es decir,

Ecuación de neutralidad
de la carga

$$n + N_{A-} = p + N_{D+} . \quad (7.17)$$

Si la temperatura de operación es tal que las impurezas se han ionizado completamente (lo cual puede considerarse que ocurre aproximadamente a temperatura ambiente), esto es, si $N_{A-} \approx N_A$ y $N_{D+} \approx N_D$, entonces la ecuación de neutralidad de la carga espacial en el semiconductor puede escribirse como

$$n + N_A = p + N_D . \quad (7.18)$$

Esta ley junto con la ley de acción de masas (7.15) nos permitirá calcular las concentraciones de e^- y h^+ en función de las concentraciones

de impurezas donadoras / aceptoras y la concentración intrínseca. Para ello, partiendo de $p = n_i^2 / n$ y sustituyéndolo en (7.18), obtenemos que

$$n + N_A = \frac{n_i^2}{n} + N_D \Rightarrow n^2 - (N_D - N_A)n - n_i^2 = 0 .$$

Al despejar en la ecuación anterior encontramos finalmente que

$$n = \frac{N_D - N_A}{2} + \sqrt{\left(\frac{N_D - N_A}{2}\right)^2 + n_i^2} \quad (7.19)$$

$$p = \frac{n_i^2}{n} . \quad (7.20)$$

7.3.1. Cálculo aproximado de n y p

Las expresiones anteriores se pueden simplificar en las siguientes condiciones:

■ Semiconductor tipo n

Si se cumple estrictamente que $N_A = 0$, la ecuación de neutralidad de la carga dice que

$$n = p + N_D .$$

Si la generación de electrones por excitación térmica (recuérdese que se excitan pares e^- / h^+) puede despreciarse frente a la generación de electrones debido a la ionización de las impurezas donadoras, es decir, si

$$N_D \gg n_i ,$$

entonces el término n_i^2 puede despreciarse en la raíz de (7.19), dando lugar a que

$$n \approx N_D \quad (7.21)$$

$$p \approx \frac{n_i^2}{N_D} . \quad (7.22)$$

■ Semiconductor tipo p

Si en este caso $N_D = 0$, la ecuación de neutralidad de la carga queda como

$$n + N_A = p .$$

Suponiendo de nuevo que la generación de huecos por excitación térmica puede despreciarse frente a la generación de huecos debido a la ionización de las impurezas aceptoras, esto es, cuando

$$N_A \gg n_i ,$$

entonces se cumplirá que $N_A \gg n$ y por tanto

$$p \approx N_A \quad (7.23)$$

$$n \approx \frac{n_i^2}{N_A} . \quad (7.24)$$

EJEMPLO 7.3 Calcular la concentración de electrones y huecos en una muestra de Si dopada con 10^{19} átomos de Al.

Dado que el Al es una impureza *aceptora*, tenemos que

$$N_A = 10^{19} \text{ m}^{-3} , \quad N_D = 0 .$$

Por otra parte, según el dato para n_i obtenido en el ejemplo 7.1, tenemos que

$$N_A \gg n_i ,$$

por lo que podemos usar las aproximaciones (7.23) y (7.24) para obtener finalmente que

$$p \approx 10^{19} \text{ m}^{-3}$$

$$n \approx \frac{(1,42 \times 10^{15})^2}{10^{19}} \approx 2 \times 10^{11} \text{ m}^{-3} .$$

7.3.2. Cálculo de E_F para semiconductores intrínsecos y extrínsecos

Si en las expresiones (7.7) y (7.9) se toman logaritmos neperianos y a continuación se restan, obtenemos que

Posición del nivel de Fermi

$$k_B T \ln \left(\frac{n}{N_C} \right) - k_B T \ln \left(\frac{p}{N_V} \right) = 2E_F - E_C - E_V .$$

Reescribiendo el segundo miembro de la expresión anterior como $2E_F - E_C - E_V = 2(E_F - E_V) - E_g$ y teniendo en cuenta (7.11), encontramos la siguiente expresión general para el nivel de Fermi en cualquier tipo de semiconductor no-degenerado:

Posición del nivel de Fermi para un semiconductor no degenerado

$$E_F = E_V + \frac{E_g}{2} + \frac{3}{4} k_B T \ln \left(\frac{m_h^*}{m_e^*} \right) + \frac{1}{2} k_B T \ln \left(\frac{n}{p} \right) \quad (7.25)$$

Semiconductor intrínseco

En un semiconductor intrínseco se cumple que $n = p$, luego al operar en (7.25), denominando como E_i al nivel de Fermi *intrínseco*, se tiene que

$$E_i = E_V + \frac{E_g}{2} + \frac{1}{2} k_B T \ln \left(\frac{N_C}{N_V} \right)$$

$$= E_V + \frac{E_g}{2} + \frac{3}{4} k_B T \ln \left(\frac{m_h^*}{m_e^*} \right) . \quad (7.26)$$

La expresión anterior indica que el nivel de Fermi para un semiconductor intrínseco se sitúa aproximadamente en el centro de la BP, desviado de ella el factor $\frac{3}{4}k_B T \ln(m_h^*/m_e^*)$. Supuesto que la temperatura no es muy alta y que $m_e^* \simeq m_h^*$, este factor es despreciable respecto al primer término y, por tanto,

$$E_i \approx E_V + \frac{E_g}{2}$$

para la mayoría de los casos típicos en los semiconductores intrínsecos, tal y como ya se predijo de forma cualitativa en el Apartado 6.3.2.

Posición del nivel de Fermi en un semiconductor intrínseco a no muy altas temperaturas

Semiconductores extrínsecos

En el supuesto de que se cumplan las aproximaciones (7.4a) y (7.4b) dadas en el apartado 7.3.1, la posición del nivel de Fermi en semiconductores extrínsecos puede igualmente determinarse con facilidad.

■ Semiconductor tipo n

Dado que en este caso $n \gg p$, la expresión (7.25) nos dice que la posición del nivel de Fermi se desplazará claramente hacia el borde inferior de BC (tal y como ya se predijo anteriormente de una forma cualitativa). Una expresión útil para el cálculo de E_F se obtiene al combinar las ecuaciones (7.7) y (7.21),

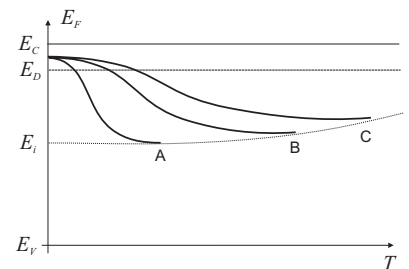
$$N_D = N_C \exp\left(-\frac{E_C - E_F}{k_B T}\right),$$

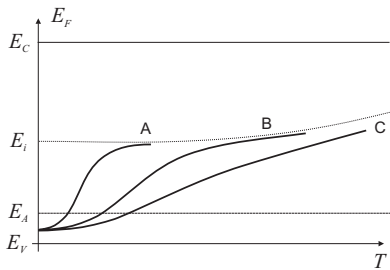
y despejar E_F , de donde

$$E_F = E_C - kT \ln \frac{N_C}{N_D}. \quad (7.27)$$

Posición del nivel de Fermi en un semiconductor extrínseco tipo n

Partiendo de (7.25), un cálculo más detallado nos mostraría (ver figura adjunta) que el nivel de Fermi disminuye primero ligeramente con la temperatura para acercarse posteriormente a la curva de E_i a altas temperaturas. Esta tendencia puede entenderse si consideramos que a altas temperaturas, todos los átomos de impurezas ya se han ionizado y, en consecuencia, la concentración de portadores de carga estará regida por los procesos de generación térmica de pares e^-/h^+ ; es decir, el semiconductor extrínseco se comporta como uno intrínseco a medida que aumenta la temperatura. Claramente esta tendencia ocurre a temperaturas más altas a medida que el nivel de impurezas aumenta en la muestra (la curva A en la figura representa menor nivel de dopaje que B y ésta a su vez que C).





Posición del nivel de Fermi en un semiconductor extrínseco tipo *p*

■ Semiconductor tipo *p*

Según la expresión (7.25), para un semiconductor tipo *p* ($p \gg n$), la posición del nivel de Fermi se desplaza hacia el borde superior de BV. De forma aproximada, se puede calcular E_F sustituyendo (7.23) en la expresión (7.9)

$$N_A = N_V \exp\left(-\frac{E_F - E_V}{k_B T}\right)$$

y despejando de aquí E_F para obtener

$$E_F = E_V + kT \ln \frac{N_V}{N_A} . \quad (7.28)$$

Tal como muestra la figura adjunta, un cálculo más detallado nos diría que la posición del nivel de Fermi se aproxima a la de E_i para altas temperaturas.

EJEMPLO 7.4 Para el problema del Ejemplo 7.3, calcular la posición del nivel de Fermi a temperatura ambiente.

Dado que en el presente caso $N_A = 10^{19} \text{ m}^{-3}$ y que, según el Ejemplo 7.1, $N_V = 5,95 \times 10^{24} \text{ m}^{-3}$, al sustituir en (7.28) obtenemos que

$$E_F - E_V = kT \ln \frac{N_V}{N_A} = 0,025 \ln \frac{5,95 \times 10^{24}}{10^{19}} = 0,33 \text{ eV}.$$

Teniendo en cuenta que $E_g = 1,1 \text{ eV}$, comprobamos que el nivel de Fermi está comprendido entre E_V y E_i .

7.4. Conductividad eléctrica en semiconductores

Según ya vimos en temas anteriores, para un **metal** la conductividad eléctrica venía dada por

$$\sigma = e\mu n ,$$

siendo su dependencia con la temperatura del tipo $\sigma \propto T^{-1}$. Esta dependencia con la temperatura provenía básicamente de la movilidad puesto que la concentración de electrones en la banda apenas variaba con la temperatura¹.

En un semiconductor, debido a la presencia de dos tipos de portadores de carga, la conductividad eléctrica debía expresarse como

$$\sigma = e(n\mu_n + p\mu_p) ,$$

¹Recuérdese que en un metal n apenas variaba con T dado que el cambio de la situación energética de los electrones en la banda debido a la excitación térmica era muy pequeño con respecto a la situación existente a $T = 0 \text{ K}$.

encontrándose experimentalmente una dependencia con la temperatura tal que existe una relación lineal entre el $\ln \sigma$ y el inverso de la temperatura, $1/T$. A continuación veremos que esta dependencia puede ya explicarse a partir de las expresiones obtenidas anteriormente en el tema.

■ Semiconductor Intrínseco

Dado que en este caso $n = p \equiv n_i$, (7.1) puede reescribirse como

$$\sigma = e(\mu_n + \mu_p)n_i. \quad (7.29)$$

En los semiconductores (y al contrario de lo que ocurre en los metales), la conductividad muestra una dependencia con la temperatura tanto en las movilidades como en la concentración intrínseca. Al sustituir (7.16) en (7.29) obtenemos que

$$\sigma = e(\mu_n + \mu_p)\sqrt{N_C N_V} \exp\left(-\frac{E_g}{2k_B T}\right).$$

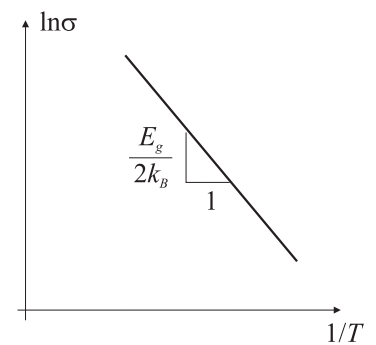
Para las movilidades se encuentra una dependencia con la temperatura del tipo $T^{-3/2}$ y dado que $\sqrt{N_C N_V}$, según (7.8) y (7.10), muestra una dependencia del tipo $T^{3/2}$, ello implica que la conductividad puede finalmente escribirse como

$$\sigma = \sigma_0 \exp\left(-\frac{E_g}{2k_B T}\right), \quad (7.30)$$

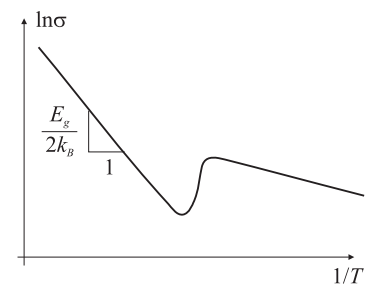
donde σ_0 es una constante que sólo depende de los parámetros del material pero no de la temperatura. Esta expresión explica satisfactoriamente los resultados experimentales encontrados anteriormente y muestra que la conductividad en los semiconductores intrínsecos es altamente dependiente del valor de la anchura de la banda prohibida y de la temperatura de trabajo. Esto último nos indica que los semiconductores intrínsecos deben operar en unas condiciones de temperatura controlada para evitar que las propiedades de los dispositivos se vean muy afectadas.

■ Semiconductor Extrínseco

El estudio de la conductividad eléctrica en los semiconductores extrínsecos es más complicada que en los intrínsecos, por lo que no abordaremos su estudio. No obstante, podemos resaltar que ese estudio nos daría la dependencia que muestra la figura adjunta para el $\ln \sigma$ con el inverso de la temperatura, $1/T$. Dado que los semiconductores extrínsecos se comportan como los intrínsecos a altas temperaturas, la figura muestra a temperaturas altas (parte izquierda de la gráfica) la misma pendiente que para el caso intrínseco. A temperaturas no tan altas, $\ln \sigma$ muestra el mismo tipo de comportamiento aunque con otra pendiente.



Conductividad eléctrica de un semiconductor intrínseco



EJEMPLO 7.5 Cálculo de la conductividad eléctrica para el Si a $T = 300\text{ K}$ y $T = 500\text{ K}$, siendo $\mu_n = 1350\text{ cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$ y $\mu_p = 480\text{ cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$.

Teniendo en cuenta el resultado del ejemplo 7.1, al sustituir en la expresión (7.29), llegamos a que

$$\sigma(T = 300\text{ K}) = 1,6 \times 10^{-19} (0,135 + 0,048) 1,42 \times 10^{15} = 4,15 \times 10^{-5} (\Omega \cdot \text{m})^{-1}.$$

Para calcular la conductividad a $T = 500\text{ K}$, suponemos que la variación más notable con la temperatura se debe únicamente a la dependencia en la exponencial, por lo que podemos escribir que

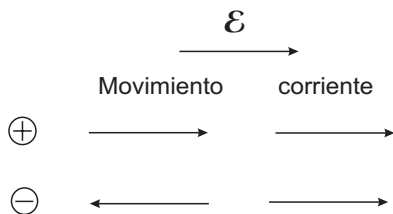
$$\frac{\sigma(T = 500\text{ K})}{\sigma(T = 300\text{ K})} = \exp \left[-\frac{1,1}{2 \cdot 8,625 \times 10^{-5}} \left(\frac{1}{500} - \frac{1}{300} \right) \right] \approx 4927$$

y, por tanto,

$$\sigma(T = 500\text{ K}) \approx 0,2 (\Omega \cdot \text{m})^{-1}.$$

7.5. Corrientes de Arrastre y Difusión

Hasta ahora, la única corriente que se ha estudiado es la relacionada con el movimiento de cargas provocado por la presencia de un campo eléctrico externo $\mathcal{E}$. Esta corriente se denominó **corriente de arrastre** y su forma para electrones y huecos era

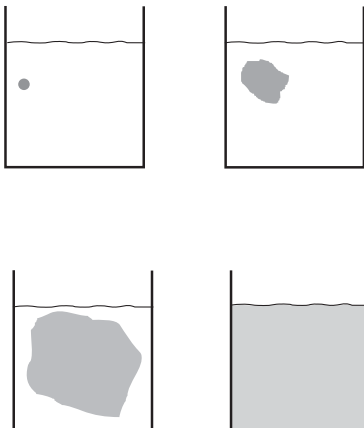


$$J_{p,arr} = e\mu_p p \mathcal{E} \quad (7.31a)$$

$$J_{n,arr} = e\mu_n n \mathcal{E}. \quad (7.31b)$$

En este apartado se verá que además de este tipo de corriente existe otro tipo, denominado **corriente de difusión**, que aparece siempre que exista una distribución no uniforme de portadores de carga.

7.5.1. Proceso de difusión



Algunos ejemplos comunes en los que encontramos procesos de difusión son:

- Proceso por el que las partículas de un gas inicialmente situado en cierta región de un recinto se expande por todo el recinto.
- Proceso por el que una gota de tinta en un líquido va diluyéndose hasta que todo el líquido se colorea.
- Proceso por el que el perfume que inicialmente estaba en un rincón de una habitación cerrada se va extendiendo hasta que toda la habitación queda “perfumada”.

El origen de los procesos de difusión anteriores hay que buscarlo en el movimiento errático de agitación térmica que muestran las partículas. Este movimiento junto con los consiguientes choques con otras partículas y con las paredes del recinto hace que las partículas traten de extenderse por todo el recinto que las contiene. Tras cada choque, las partículas tienen igual probabilidad de dirigirse en cualquier dirección, lo que da lugar a que exista una transferencia neta o flujo de partículas desde las zonas más pobladas a las menos pobladas. Este proceso de difusión dura hasta que se homogeniza la concentración, η , de partículas en el recinto (la permanente agitación térmica ya no provocaría una transferencia neta de partículas). Por consiguiente, podemos decir que

La causa del proceso de difusión es la existencia de concentraciones no uniformes de partículas, $\eta = \eta(x)$.

Dado que una concentración inhomogénea implica que

$$\frac{d\eta(x)}{dx} \neq 0,$$

podemos decir que el proceso de difusión ocurre mientras exista un *gradiente de concentración* (en una dimensión, el gradiente de una función $f(x)$ es precisamente su derivada respecto a x). En este sentido podemos establecer que el flujo de partículas (número de partículas por unidad de área) por unidad de tiempo en la posición x , $\Phi(x)$, será proporcional al gradiente de la concentración,

$$\Phi(x) \propto \frac{d\eta(x)}{dx},$$

lo que nos permite escribir que

$$\Phi(x) = -D \frac{d\eta(x)}{dx}, \quad (7.32)$$

donde D es el *coeficiente de difusión* característico de cada tipo de proceso. El signo menos en la expresión anterior se añade para indicar que el movimiento de las partículas se producirá desde donde hay más concentración hasta donde hay menos, es decir, en el sentido *decreciente* de la concentración.

7.5.2. Corriente de difusión

En un semiconductor donde tenemos portadores libres de carga (esto es, “gases” de electrones y de huecos) también pueden darse procesos de difusión si la concentración de portadores no es homogénea. No obstante, dado que los portadores son partículas *cargadas*, existen algunas diferencias importantes con las situaciones descritas

en el proceso anterior (que sólo implicaban a partículas eléctricamente neutras).

En primer lugar un flujo de partículas cargadas originará obviamente una corriente eléctrica, que se conoce como **corriente de difusión**. Por otra parte, si el origen de las inhomogeneidades de portadores libres proviene de una distribución no uniforme de impurezas, debemos tener en cuenta que éstas se ionizan y permanecen básicamente inmóviles mientras que los electrones o huecos asociados a éstas son prácticamente “libres”. En este caso, los procesos de difusión de portadores libres darán lugar a una descompensación espacial de la carga eléctrica que provocará la *aparición de un campo eléctrico interno*, $\mathcal{E}_i$, que tiende a oponerse al propio proceso de difusión (es decir, el proceso de difusión acaba antes de que se haya homogenizado la concentración de carga).

Si las concentraciones de electrones y huecos en el semiconductor son no uniformes, los flujos de difusión vendrán entonces dados por

$$\Phi_p(x) = -D_p \frac{dp(x)}{dx} \quad (7.33a)$$

$$\Phi_n(x) = -D_n \frac{dn(x)}{dx}, \quad (7.33b)$$

siendo D_n y D_p los coeficientes de difusión para e^- y h^+ respectivamente. La densidad de corriente de difusión para electrones y huecos se obtendrá simplemente multiplicando la carga por el flujo de difusión de partículas por unidad de tiempo, por lo que

$$J_{p,dif}(x) = (+e) \left[-D_p \frac{dp(x)}{dx} \right] = -eD_p \frac{dp(x)}{dx} \quad (7.34a)$$

$$J_{n,dif}(x) = (-e) \left[-D_n \frac{dn(x)}{dx} \right] = eD_n \frac{dn(x)}{dx}. \quad (7.34b)$$

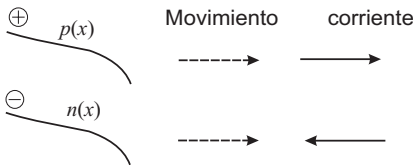
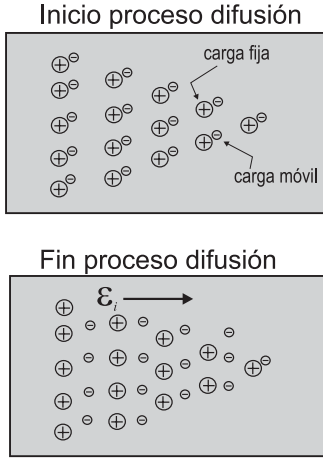
Electrones y huecos se mueven en el mismo sentido si sus respectivas concentraciones varían del mismo modo. En este caso, sus corrientes de difusión resultan en sentidos opuestos.

7.5.3. Corriente total

Si además del proceso de difusión, el semiconductor está sometido a un campo eléctrico externo, $\mathcal{E}(x)$, entonces la densidad de corriente de electrones, $J_n(x)$, y la de huecos, $J_p(x)$, deberán incluir términos correspondientes a los dos procesos simultáneos de movimiento de cargas que ocurren en el semiconductor, a saber, arrastre y difusión:

$$J_p(x) = J_{p,arr}(x) + J_{p,dif}(x) = e\mu_p p(x)\mathcal{E}(x) - eD_p \frac{dp(x)}{dx} \quad (7.35)$$

$$J_n(x) = J_{n,arr}(x) + J_{n,dif}(x) = e\mu_n n(x)\mathcal{E}(x) + eD_n \frac{dn(x)}{dx}. \quad (7.36)$$



Existe una relación entre los coeficientes de difusión y movilidad, que se conoce como *relación de Einstein*, que establece la siguiente relación:

$$\frac{D_{n,p}}{\mu_{n,p}} = \frac{k_B T}{q}, \quad (7.37)$$

siendo q la carga elemental de los portadores de carga en el proceso, en nuestro caso e .

La densidad de corriente total en el semiconductor, $J_{\text{total}}(x)$, será obviamente la suma de las correspondientes a electrones y huecos, esto es,

$$J_{\text{total}}(x) = J_n(x) + J_p(x), \quad (7.38)$$

cuyos sentidos se muestran en la Fig. 7.1.

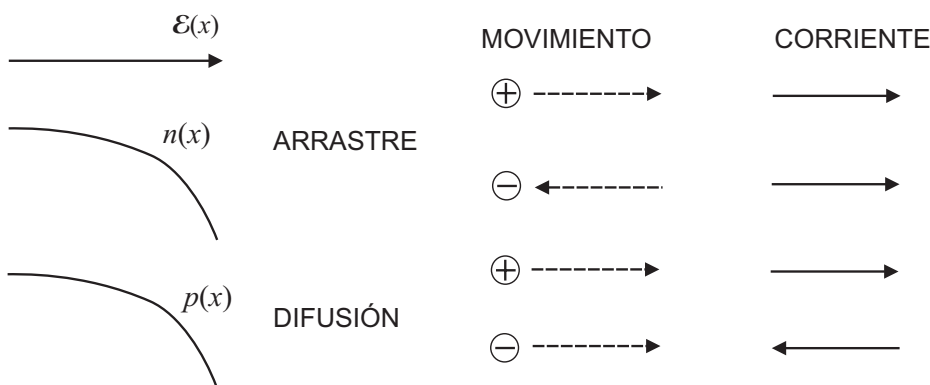


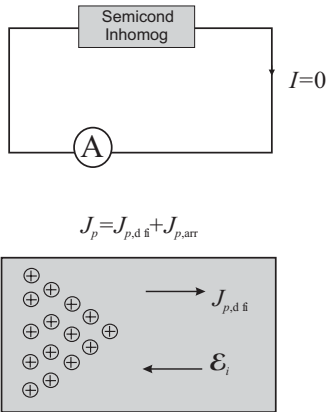
FIGURA 7.1: Sentido de las corrientes de difusión y de arrastre para electrones y huecos.

Es importante señalar que la corriente de arrastre es proporcional a la concentración de portadores, por lo que los portadores *minoritarios* apenas contribuirían a esta corriente de arrastre. Por otra parte, dado que la corriente de difusión es proporcional al gradiente de la concentración, entonces aunque la concentración de minoritarios pudiera ser órdenes de magnitud más pequeña que la de mayoritarios, su gradiente sí puede ser del mismo orden o incluso mayor y, en consecuencia, contribuir muy significativamente a la corriente de difusión y, por ende, a la corriente total. Este importante resultado puede resumirse como

los portadores minoritarios pueden contribuir significativamente a la corriente total mediante procesos de difusión.

7.5.4. Campo eléctrico interno

En un semiconductor con un dopaje no uniforme de impurezas (esto es, con una concentración inhomogénea de portadores), en *ausencia de campo externo aplicado* y en condiciones de *equilibrio*, la corriente



total, tanto de electrones como de huecos, debe ser cero²:

$$J_n(x) \equiv J_p(x) = 0.$$

Por ejemplo si consideramos el caso de un semiconductor tipo p dopado inhomogéneamente, $p = p(x)$ (en la figura se representan los portadores de carga *móviles*), es claro que inicialmente existirá una corriente de difusión de huecos debido a la existencia de un gradiente no nulo en la concentración de huecos, $J_{p,dif} \neq 0$. Dado que en el equilibrio la corriente total de huecos es nula, esta corriente de difusión de huecos debe verse compensada por una corriente de arrastre de huecos en sentido contrario. Claramente, esta corriente de arrastre debe estar originada por la aparición de un *campo eléctrico interno*, $\mathcal{E}_i$, que sea responsable de la creación de dicha corriente.

Tal como se ha discutido en el Apartado 7.5.2, el origen de este campo eléctrico interno puede entenderse partiendo del hecho de que la muestra era originalmente neutra. Podemos ver que existen dos tendencias contrapuestas en el semiconductor dopado no uniformemente. Por una parte existe una tendencia hacia la inhomogeneidad de los portadores libres debido a la *atracción eléctrica* de las impurezas ionizadas que, buscando la neutralidad local de la carga, tiende a igualar la distribución de impurezas ionizadas con la de portadores libres. Por otra parte, a causa de la difusión (que solo afecta a las cargas *móviles*), existe una tendencia a la homogenización de la concentración de portadores. Ambas tendencias tienden a contrarrestarse, dando lugar a una distribución final de portadores intermedia entre la distribución inicial de impurezas y la homogenización total. En este sentido, el proceso de difusión genera un movimiento neto de los portadores de carga que provoca la aparición de una densidad de carga neta, $\rho(x)$, en la muestra. A su vez, la aparición de esta densidad de carga neta dará lugar a un campo *electrostático* y, consecuentemente, a un potencial electrostático, $V(x)$, que estará relacionado con la densidad de carga, $\rho(x)$, mediante la siguiente ecuación:

$$\frac{d^2 V(x)}{dx^2} = -\frac{\rho(x)}{\epsilon}, \quad (7.39)$$

denominada *ecuación de Poisson*.

Teniendo en cuenta que

$$J_p(x) = e \left[\mu_p p(x) \mathcal{E}_i(x) - D_p \frac{dp(x)}{dx} \right] = 0,$$

podemos obtener, tras despejar, la siguiente expresión para el campo eléctrico interno:

$$\mathcal{E}_i = \frac{D_p}{\mu_p} \frac{1}{p(x)} \frac{dp(x)}{dx} = \frac{k_B T}{e} \frac{1}{p(x)} \frac{dp(x)}{dx} = \frac{k_B T}{e} \frac{d}{dx} \ln p(x). \quad (7.40)$$

²Nótese que si la corriente fuese distinta de cero se estaría generando energía de la nada dado que al paso de la corriente hay *resistencia*.

Dado que este campo es irrotacional puro (proviene únicamente de las cargas eléctricas), $\mathcal{E}_i$ derivará de un potencial V ,

$$\mathcal{E}_i = -\frac{dV(x)}{dx},$$

y por tanto (7.40) puede reescribirse como

$$\frac{dV(x)}{dx} = -\frac{k_B T}{e} \frac{d}{dx} \ln p(x). \quad (7.41)$$

Si integramos la ecuación anterior entre dos puntos arbitrarios, 1 y 2,

$$\int_1^2 dV = -\frac{k_B T}{e} \int_1^2 d \ln p,$$

encontramos finalmente que

$$V_{21} = -\frac{k_B T}{e} \ln \frac{p_2}{p_1}, \quad (7.42)$$

donde $V_{21} = V_2 - V_1$ y p_1, p_2 son las concentraciones de huecos en los puntos 1 y 2 respectivamente. Es interesante notar que la expresión anterior nos dice que

la diferencia de potencial que se establece entre dos puntos de una muestra de semiconductor no homogéneo sólo depende de la relación entre las concentraciones en estos puntos y no de la distancia entre los puntos o de la forma de la concentración entre estos puntos.

A partir de (7.42), encontramos la siguiente relación entre las concentraciones en función de la diferencia de potencial:

$$\frac{p_2}{p_1} = \exp\left(-\frac{eV_{21}}{k_B T}\right). \quad (7.43)$$

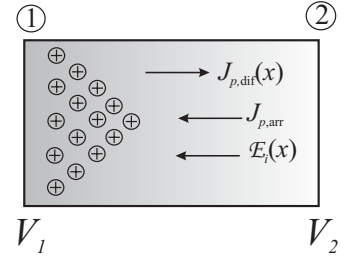
Si el proceso anterior se hubiese hecho para la corriente de electrones³, procediendo de una forma análoga se hubiese llegado igualmente a que

$$\frac{n_2}{n_1} = \exp\left(\frac{eV_{21}}{k_B T}\right). \quad (7.44)$$

Combinando ahora las expresiones (7.43) con (7.44) obtenemos que

$$\frac{p_2}{p_1} = \frac{n_1}{n_2} \Rightarrow n_1 p_1 = n_2 p_2.$$

³Notar que si $p = p(x)$, esto implica que $n = n(x)$ dado que donde hay mayor concentración de huecos, habrá mayor recombinación y por tanto esto afectará a la concentración de electrones.



Potencial debido a una concentración de portadores no uniforme

Dado que los puntos 1 y 2 son puntos arbitrarios y el producto de la concentración de huecos por electrones viene fijado por la ley de acción de masas (7.15), encontramos la siguiente expresión general de la ley de acción de masas:

Ley de acción de masas para un semiconductor inhomogéneo en equilibrio

$$n(x)p(x) = n_i^2. \quad (7.45)$$

EJEMPLO 7.6 Una muestra de Si es dopada con átomos donadores de tal manera que $N_d(x) = N_0 \exp(-ax)$. (a) Encuentre una expresión para el campo interno supuesto que $N_d \gg n_i$. (b) Calcule el valor del campo si $a = 1 (\mu\text{m})^{-1}$.

- (a) Partiendo de que $J_n(x) = 0$ y siguiendo un proceso análogo al realizado en la sección anterior, llegamos a que

$$\mathcal{E}_i = -\frac{k_B T}{e} \frac{d}{dx} \ln n(x),$$

que en nuestro caso, admitiendo que $n(x) \simeq N_d(x)$, se convierte en

$$\mathcal{E}_i = \frac{k_B T}{e} a.$$

- (b) Sustituyendo los valores oportunos tenemos que

$$\mathcal{E}_i = 0,0259 \times 10^6 = 259 \text{ V/m}.$$

7.6. Velocidad de generación y recombinación

Antes de analizar la generación y recombinación de portadores vamos a discutir brevemente algunas cuestiones relacionadas con el equilibrio. Es bien conocida la propiedad natural de todo sistema físico de responder a una *acción* mediante una *reacción*. La acción puede ser *interna* (realizada desde dentro del sistema) o bien *externa* mientras que la reacción será siempre interna. En función del balance entre la acción y la reacción del sistema diremos que éste presenta

■ Equilibrio estadístico

Cuando el efecto combinado de la acción / reacción produzca una situación en la que las variables del sistema sólo muestren pequeñas fluctuaciones en torno a un valor medio fijo en el tiempo.

■ Equilibrio térmico

Cuando no se ejerce acción externa sobre el sistema, salvo el efecto de la temperatura.

■ Desequilibrio estacionario

Existe acción externa pero tras cierto tiempo de transición (usualmente muy pequeño) se alcanza una situación en la que las variables del sistema permanecen constantes en el tiempo.

■ No equilibrio

Cuando las variables del sistema varían con el tiempo.

Ya se discutió en el Apartado 6.2 que, en un semiconductor en *equilibrio térmico*, el proceso de generación de portadores de carga era *interno* (generación *térmica* fundamentalmente), debiéndose cumplir además que la velocidad de generación *interna*, G_{int} , fuese igual a la velocidad de recombinación, R , —ver expresión (6.3).

Si existen *acciones externas*, además de los procesos de generación interna, pueden darse otros procesos de generación debidos a causas *externas*, G_{ext} : iluminación, campos intensos aplicados, etc, que rompen la situación de equilibrio. Si consideramos que, en estas situaciones de no equilibrio, todos los procesos de generación / recombinación sólo crean / destruyen pares de e^- / h^+ , entonces es conveniente introducir el concepto de *velocidad de recombinación neta*, U , que se define como la diferencia entre la velocidad de recombinación y la de generación interna,

$$U = R - G_{\text{int}} . \quad (7.46)$$

Velocidad de recombinación neta

(Notemos que U nos informa básicamente sobre los procesos *internos*, es decir, recombinación y generación interna de pares e^- / h^+). Dado que la acción externa provoca una descompensación entre los procesos de generación y recombinación, existirá una variación de las concentraciones de portadores con el tiempo, que pueden expresarse como

$$\left(\frac{\partial n}{\partial t} \right)_{g-r} = G_{n,\text{ext}} - U \quad (7.47a)$$

$$\left(\frac{\partial p}{\partial t} \right)_{g-r} = G_{p,\text{ext}} - U . \quad (7.47b)$$

Teniendo en cuenta la expresión (6.1) para la velocidad de recombinación, R , y que según (6.3) $G_{\text{int}} = R_{\text{int}} = \alpha_r n_i^2$, la velocidad de recombinación neta puede escribirse como

$$U = R - G_{\text{int}} = \alpha_r np - \alpha_r n_i^2 = \alpha_r (np - n_i^2) . \quad (7.48)$$

Nótese que en una situación de *no equilibrio* no se cumplirá la ley de acción de masas ($np \neq n_i^2$).

Si la concentración de portadores fuera del equilibrio se expresa en términos de la concentración de portadores en equilibrio (lo cual se denotará a partir de ahora con el subíndice “0”) y de la concentración de portadores en *exceso* (denotados por el símbolo δ), podremos

n Concentración de portadores
 n_0 Concent. portad. en equilibrio
 δn Concent. de port. en exceso

escribir que

$$n = n_0 + \delta n \quad (7.49a)$$

$$p = p_0 + \delta p. \quad (7.49b)$$

Teniendo en cuenta las expresiones anteriores y que la ley de acción de masas exige que $n_0 p_0 = n_i^2$, encontramos que la expresión (7.48) puede reescribirse como

$$U = \alpha_r (p_0 \delta n + n_0 \delta p + \delta n \delta p). \quad (7.50)$$

Si suponemos que la acción externa genera el mismo número de electrones que de huecos [$\delta n(t=0) = \delta p(t=0)$], y puesto que los e^- y h^+ se recombinan por pares, entonces el exceso *instantáneo* de ambos tipos de portadores será también idéntico,

$$\delta n(t) = \delta p(t).$$

Bajo este supuesto, en un semiconductor tipo n tal que $p_0 \ll n_0$ y en condiciones de **inyección débil** (esto es, $\delta n \ll n_0$), la velocidad de recombinación neta puede aproximarse mediante

$$U = \alpha_r n_0 \delta p = \frac{\delta p}{\tau_p}, \quad (7.51)$$

donde la constante $\tau_p = 1/\alpha_r n_0$ se denomina *tiempo de vida media de los portadores minoritarios*.

En el caso anterior, la ecuación que nos da la variación temporal de la concentración de los *portadores minoritarios* debido a los procesos de generación y recombinación vendría dada por

$$\left(\frac{\partial p}{\partial t} \right)_{g-r} = \left(\frac{\partial \delta p}{\partial t} \right)_{g-r} = G_{p,\text{ext}} - \frac{\delta p}{\tau_p}. \quad (7.52)$$

7.7. Ecuación de continuidad

En el Apartado 7.6 ya discutimos que cuando se produce una generación neta de portadores en un semiconductor como consecuencia de una acción exterior, el semiconductor reacciona oponiéndose a dicha generación mediante una recombinación neta, tanto más importante cuanto mayor sea la generación debida a la causa externa. Cuando ambas tendencias se contrarrestan mutuamente se alcanza un **régimen estacionario** (o desequilibrio estacionario), pudiéndose considerar el *equilibrio* como un caso particular de régimen estacionario cuando no existe acción externa alguna. Si la acción exterior cambia con el tiempo ello dará lugar a un **régimen dinámico** (situación de no

equilibrio) en el que predominará una de las dos tendencias de acción o reacción.

Para el análisis general de un régimen dinámico debe tenerse en cuenta que la acción y la reacción no tienen por qué ocurrir en los mismos puntos. La generación por causas externas puede ocurrir en cierto lugar y los portadores generados pueden originar corrientes que los llevan a recombinarse en otros lugares distintos. Las ecuaciones que rigen el proceso dinámico general se denominan ecuaciones de continuidad de las concentraciones de portadores.

En el caso de un semiconductor, la variación en el tiempo de la concentración de portadores minoritarios en un elemento de volumen, dV , puede deberse a dos causas distintas:

1. Generación y/o recombinación neta,
2. Transporte o flujo variable de portadores a través del volumen.

En consecuencia, para un semiconductor tipo n , la variación temporal “total” de la concentración de portadores minoritarios (huecos), vendrá dada por

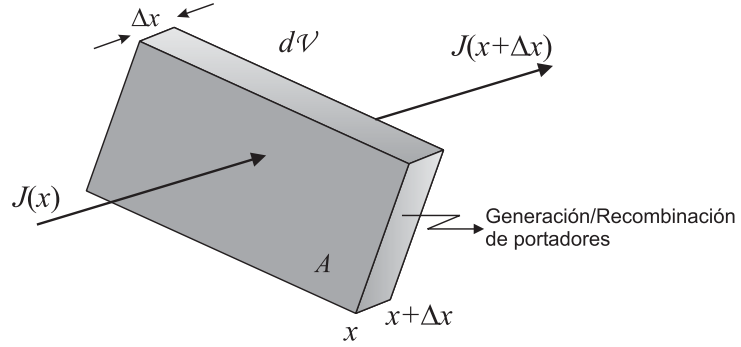
$$\frac{\partial p}{\partial t} = \left(\frac{\partial p}{\partial t} \right)_{\text{transp}} + \left(\frac{\partial p}{\partial t} \right)_{\text{gen-rec}} \quad (7.53)$$

$\frac{\partial p}{\partial t}$	=	$\left(\frac{\partial p}{\partial t} \right)_{\text{transp}}$	+	G_{ext}	-	$U [= R - G_{\text{int}}]$
↓		↓		↓		↓
<i>incremento neto del número de huecos por unidad de tiempo en dV</i>	=	<i>diferencia entre el número de h^+ entrando y saliendo de dV en unidad tpo.</i>	+	<i>número de h^+ generados en dV en la unidad de tpo. debido a acción ext.</i>	-	<i>número de h^+ recombinados en dV en la unidad de tpo</i>
				↓		↓
				<i>velocidad de gener. h^+ en dV debido a acciones externas</i>		<i>velocidad de recomb. neta de h^+ en dV</i>

La expresión anterior nos diría, por ejemplo, que si en dV se acumulan 3 h^+ por unidad de volumen en la unidad de tiempo puede ser debido a que han entrado 12, han salido 11, se han generado por acciones externas 3, por acciones internas 1 y se han recombinado globalmente 2.

La variación de la concentración debida a la generación/recombinación de portadores fue analizada en el Apartado 7.6 donde se obtuvo en (7.52) para la concentración de portadores minoritarios que

$$\left(\frac{\partial p}{\partial t} \right)_{\text{gen-rec}} = G_{p,\text{ext}} - \frac{\delta p}{\tau_p}.$$



Si queremos calcular el número de h^+ que entra por unidad de tiempo en dV a través de la superficie A en x , magnitud que denominaremos $\Omega_p(x)$, podemos tener en cuenta que al dividir la densidad de corriente de huecos $J_p(x)$ por la carga e podemos así obtener el número de huecos por unidad de tiempo y superficie que entra en el elemento diferencial. Al dividir $J_p(x)$ por la longitud del elemento diferencial Δx se obtendrá ya finalmente $\Omega_p(x)$ y análogamente para $\Omega_p(x + \Delta x)$. Por tanto

$$\left(\frac{\partial p}{\partial t} \right)_{\text{transp}} \Big|_{x \rightarrow x+\Delta x} = \frac{1}{e} \frac{J_p(x) - J_p(x + \Delta x)}{\Delta x},$$

que al tomar el límite $\Delta x \rightarrow 0$, puede reescribirse como

$$\left(\frac{\partial p(x, t)}{\partial t} \right)_{\text{transp}} = -\frac{1}{e} \frac{\partial J_p(x, t)}{\partial x}.$$

Al agrupar los términos de generación / recombinación con los términos de arrastre, en condiciones de inyección débil, la ecuación de continuidad para huecos vendrá dada finalmente por

Ecuación de continuidad para los
minoritarios (huecos) en
condiciones de inyección débil

$$\frac{\partial \delta p(x, t)}{\partial t} = -\frac{1}{e} \frac{\partial J_p}{\partial x} - \frac{\delta p}{\tau_p} + G_{p, \text{ext}}. \quad (7.54)$$

Análogamente para electrones se tendrá que

$$\frac{\partial \delta n(x, t)}{\partial t} = \frac{1}{e} \frac{\partial J_n}{\partial x} - \frac{\delta n}{\tau_n} + G_{n, \text{ext}}. \quad (7.55)$$

7.7.1. Ecuación de difusión

En muchas situaciones prácticas tenemos una muestra *homogénea* (la densidad de impurezas es uniforme en todo el material) donde encontramos que la corriente de difusión de portadores *minoritarios* es mucho mayor que la de arrastre, admitiendo además que no existe generación de portadores en el *volumen* del semiconductor debida a agentes externos, $G_{\text{ext}} = 0$. En estas situaciones (en el caso de que

los minoritarios sean los huecos) se tiene que la densidad de corriente total de huecos vendría dada por

$$J_p \approx J_p^{\text{dif}} = -eD_p \frac{\partial(p_0 + \delta p)}{\partial x} = -eD_p \frac{\partial \delta p}{\partial x}. \quad (7.56)$$

Al sustituir la expresión anterior en la ecuación de continuidad (7.54) obtenemos la siguiente **ecuación de difusión de minoritarios** (en este caso, huecos):

$$\frac{\partial \delta p}{\partial t} = D_p \frac{\partial^2 \delta p}{\partial x^2} - \frac{\delta p}{\tau_p} \quad (7.57) \quad \text{Ecuación de difusión para huecos}$$

y similarmente si los minoritarios fuesen los electrones:

$$\frac{\partial \delta n}{\partial t} = D_n \frac{\partial^2 \delta n}{\partial x^2} - \frac{\delta n}{\tau_n}. \quad (7.58) \quad \text{Ecuación de difusión para electrones}$$

7.7.2. Inyección constante de portadores

Una de las situaciones de mayor interés práctico que puede analizarse mediante la ecuación de difusión es aquella **situación estacionaria** que se mantiene gracias a una inyección constante de portadores que hace que el exceso en la concentración de minoritarios no varíe con el tiempo, es decir (para el caso de huecos),

$$\frac{\partial \delta p}{\partial t} = 0.$$

Para el caso de una muestra homogénea de semiconductor tipo n en condiciones de inyección débil y generación externa nula en el volumen, la ecuación de difusión (7.57) para los minoritarios puede expresarse como

$$\frac{d^2 \delta p}{dx^2} = \frac{\delta p}{D_p \tau_p} \equiv \frac{\delta p}{L_p^2}, \quad (7.59) \quad \text{Ecuación de difusión para el estado estacionario}$$

donde $L_p = \sqrt{D_p \tau_p}$ se conoce como **longitud de difusión** para huecos. (Nótese que las derivadas que aparecen en la ecuación son *totales*).

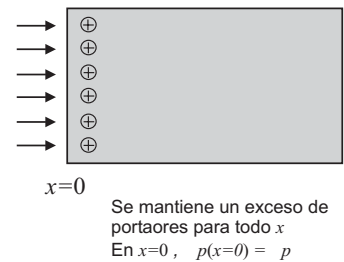
Si, por ejemplo, se supone que un exceso de huecos son inyectados en el semiconductor a través de la superficie en $x = 0$, tal que $\delta p(x = 0) = \Delta p$, al resolver (7.59) obtenemos que

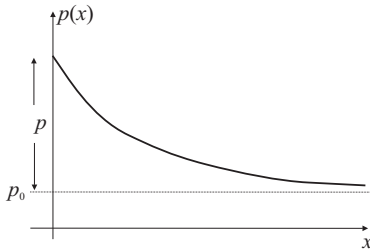
$$\delta p(x) = Ae^{x/L_p} + Be^{-x/L_p}.$$

Dado que la solución anterior no puede crecer para $x \rightarrow \infty$, la constante A debe hacerse cero. Por otra parte, dado que

$$\delta p(x = 0) \equiv \Delta p = B,$$

tenemos finalmente que





$$p(x) = p_0 + \Delta p e^{-x/L_p} \quad (7.60)$$

Esta expresión da una idea de la distancia (en la práctica un número escaso de veces L_p) a la cual prácticamente se recupera el equilibrio. En rigor, L_p puede interpretarse como la distancia media en el movimiento de difusión del h^+ antes de recombinarse.

7.8. Problemas propuestos

7.1: La energía de la banda prohibida del germanio puro es $E_g = 0,67$ eV. (a) Calcular el número de electrones por unidad de volumen en la banda de conducción a 250 K, 300 K y 350 K. (b) Hacer lo mismo para el silicio suponiendo que $E_g = 1,1$ eV. La masa efectiva de los electrones y huecos son en el germanio es $0,12 m_e$ y $0,23 m_e$, y en el silicio $0,31 m_e$ y $0,38 m_e$, donde $m_e = 9,1 \times 10^{-31}$ kg es la masa de electrón libre.

Sol. [en m^{-3}] (a): $0,023 \times 10^{19}$, $0,40 \times 10^{19}$, $3,24 \times 10^{19}$; (b): $0,032 \times 10^{16}$, $0,29 \times 10^{16}$, $7,7 \times 10^{16}$

7.2: Supóngase que la masa efectiva de los huecos en un material es cuatro veces la de los electrones. A que temperatura el nivel de Fermi estará un 10 % por encima del punto medio de la banda prohibida. $E_g = 1$ eV.

Sol. $T = 557,6$ K

7.3: La anchura de la banda prohibida para el Ge es $E_g = 0,67$ eV. Las masas efectivas de electrones y huecos son respectivamente $m_e^* = 0,12m_e$ y $m_h^* = 0,23m_e$ (m_e es la masa del electrón libre). Calcular a 300 K: **a)** la energía de Fermi; **b)** la densidad de electrones; y **c)** la densidad de huecos.

Sol. (a) $E_F = E_V + 0,3476$ eV; (b) $n = n_i = 4,05 \times 10^{18} m^{-3}$; (c) $p = n \equiv n_i$.

7.4: Los valores de la conductividad del germanio puro a las temperaturas en K: (300,350,400, 450,500) son respectivamente en $\Omega^{-1}m^{-1}$: (2,13,52,153,362). **a)** Hacer una gráfica de $\ln \sigma$ frente a $1/T$. **b)** Determinar E_g para el germanio.

Sol. $E_g = 0,67$ eV.

7.5: En el tema se ha visto que la introducción de átomos donadores puede incrementar fuertemente la concentración de electrones en BC. Por otra parte, la ley de acción de masas nos dice que este incremento implica una disminución igualmente fuerte en la concentración de huecos en BV. Explique las razones físicas de esta importante disminución de huecos.

7.6: La conductividad del Ge puro se incrementa en un 50 % cuando la temperatura pasa de 20 a 30 grados centígrados. **a)** ¿Cuál es la anchura de la banda prohibida?; **a)** Teniendo en cuenta que para el Si, $E_g = 1,1$ eV, ¿cuál es el porcentaje de cambio en la conductividad para el mismo cambio de temperatura?.

Sol. (a) $E_g = 0,61$ eV; (b): 105 %.

7.7: ¿Cuánto tiempo tardará un electrón en recorrer $1 \mu m$ en Si puro sometido a un campo eléctrico de $100 V/cm$?. Repita el cálculo para un campo de $10^5 V/cm$.

7.8: Una muestra de Si es dopada con $5 \times 10^{16} cm^{-3}$ átomos donadores y $2 \times 10^{16} cm^{-3}$ átomos aceptores. Encuentre la posición del nivel de Fermi respecto al intrínseco a 300K.

7.9: Se utiliza como resistencia de una zona de un circuito integrado una barra de silicio tipo N de 2 mm de longitud y de $2,5 \times 10^{-5} m^2$ de sección. Sabiendo que la concentración de átomos donadores es $N_D = 5 \times 10^{13} cm^{-3}$ y que la movilidad de electrones

es $\mu_n = 1500 \text{ cm}^2/\text{Vs}$, determinar su resistencia a 300 K demostrando que la contribución de huecos es despreciable a la conductividad. Datos: $\mu_p = 475 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$; $n_i = 1,45 \times 10^{16} \text{ m}^{-3}$
Sol. $R \approx 66 \Omega$.

7.10: A una barra de Ge de 10 cm de longitud y 2 cm^2 de sección se le aplica una d.d.p. de 10 V entre sus extremos. Conociendo como datos la concentración intrínseca de portadores, $n_i = 2,36 \times 10^{19} \text{ m}^{-3}$, que $\mu_n(300\text{K}) = 0,39 \text{ m}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ y que $\mu_p(300\text{K}) = 0,182 \text{ m}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$, determinar : **a)** la resistividad del Ge; **b)** la resistencia de la barra; **c)** la velocidad de arrastre de electrones y huecos; y **d)** la corriente que circula por la barra.
Sol. (a) $\rho = 0,462 \Omega\text{m}$; (b) $R = 231,2 \Omega$; (c) $v_n = 39 \text{ m/s}$, $v_p = 18 \text{ m/s}$.

7.11: Una muestra de Ge tipo N posee una concentración de impurezas donadoras dada por $N_D = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$. Determinar la concentración de electrones y huecos a 500 K sabiendo que la concentración intrínseca viene dada por la expresión

$$n_i = CT^{3/2} \exp(-E_g/(2kT)),$$

siendo $C = 1,91 \cdot 10^{21} \text{ m}^{-3}\text{K}^{-3/2}$, $E_g = 0,67 \text{ eV}$.

Sol. $p = 8,34 \times 10^{21} \text{ m}^{-3}$, $n = 9,34 \times 10^{21} \text{ m}^{-3}$

7.12: Una muestra de Si es dopada con 10^{17} átomos/ cm^3 de fósforo. **a)** ¿Qué valor tendrá la resistividad del material?. **b)** Calcule la tensión Hall que se mediría en una muestra de $100 \mu\text{m}$ de espesor recorrida por una corriente de 1 mA y sometida a un campo magnético de 1 kG.

Sol.: **a)** $\rho = 0,0893 \Omega\cdot\text{cm}$; **b)** $|V_H| = 62,5 \mu\text{m}$.

7.13: Una muestra de Si a 300 K presenta dos niveles independientes de donadores con densidades $N_{D1} = 1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ y $N_{D2} = 2 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, localizados a 100 meV y 200 meV por debajo del borde inferior de BC. Supuesta ionización total de los donadores, obtenga la ecuación de neutralidad de la carga para este caso y encuentre el valor de la concentración de electrones en BC. ¿Cómo cambiará este valor si se añaden impurezas aceptoras con una densidad de $0,9 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$?

7.14: Una muestra “intrínseca” de InP es dopada con impurezas aceptoras desde un lado de tal modo que obtenemos un perfil dado por $N_A(z) = N_A(0)e^{-bz}$, donde z representa la coordenada en el interior de la muestra y $N_A(0)$ la concentración en la superficie. Además se cumple que para $z \rightarrow \infty$, $N_A \rightarrow n_i$, la concentración intrínseca de portadores. **a)** Calcule el perfil de dopado y encuentre una expresión para el campo eléctrico que se instauraría en equilibrio térmico si $N_A \gg n_i$. **b)** Obtenga el valor del campo eléctrico si $b = (2\mu\text{m})^{-1}$.

Capítulo 8

Unión p-n

8.1. Introducción

Las aplicaciones eléctricas y ópticas más interesantes de los semiconductores surgen cuando se dopan regiones vecinas con distintos tipos de impurezas. En este sentido, la mayoría de los dispositivos semiconductores usados en Electrónica contienen al menos una unión entre un material tipo p y uno tipo n . Las uniones p-n son fundamentales para la realización de funciones tales como la rectificación, amplificación y conmutación tanto de señales electrónicas como optoelectrónicas. En consecuencia, podemos considerar a la unión p-n como el *elemento básico* operativo de diversos componentes electrónicos y optoelectrónicos como diodo rectificador, diodo Zener, diodo túnel, transistor bipolar, fotodiodo, LDR, célula fotovoltaica, diodo LED, láser de inyección, etc.

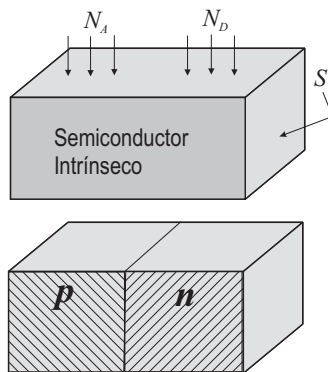
Para el estudio de la unión p-n se usará un modelo simplificado que es la *unión abrupta*. Esta unión no es en sentido estricto la que se encuentra en los diversos dispositivos pero es suficientemente simple como para poder ser tratada cualitativa y cuantitativamente y, por otro parte, es suficientemente realista como para ofrecer un comportamiento físico muy próximo al que ocurre en las *uniones difusas*.

En principio estudiaremos la unión p-n en equilibrio (esto es, sin acción externa) para después analizar el efecto de una polarización externa sobre la unión. En primer lugar estudiaremos este efecto desde un punto de vista cualitativo para posteriormente obtener las expresiones de las diversas corrientes. Es interesante señalar el enorme cambio que se observa en la característica $I \leftrightarrow V$ de una unión p-n respecto a la característica de una muestra homogénea de semiconductor dopado (que se comporta como una simple resistencia). Aparecen nuevos efectos físicos relacionados con la unión que abren muchas posibilidades al diseño de nuevos y eficaces dispositivos.

Una vez realizado el estudio básico de las corrientes de la unión,

estudiaremos también su comportamiento optoelectrónico con el objetivo de aplicarlo al análisis de diversos componentes como el diodo LED y el diodo láser.

8.2. Unión p-n en equilibrio



Tal como se ha comentado anteriormente, el estudio de la unión p-n en equilibrio se realizará usando el modelo de la **unión abrupta** sin excitación externa y, por tanto, sin corriente neta en la unión. Esta unión abrupta estará constituida por una muestra original de semiconductor intrínseco de sección S constante que es dopada *uniformemente* en un lado de la unión por impurezas aceptoras (de concentración N_A) y en el otro lado por impurezas donadoras (cuya concentración será N_D).

8.2.1. Potencial de Contacto

Según se discutió en el Apartado 7.5.2, al poner en contacto íntimo los dos lados de la unión p-n comenzará un proceso de difusión debido a la diferencia de concentración de portadores en ambos lados de la unión. Se inicia un flujo de huecos de $p \rightarrow n$ y simultáneamente un flujo de electrones de $p \leftarrow n$. Este proceso de difusión (que intenta igualar las concentraciones en ambos lados de la unión) continúa hasta establecimiento de un campo electrostático interno suficientemente intenso como para oponerse al movimiento de las cargas (ver Apartado 7.5.4). La ausencia de corriente neta en el equilibrio implica que

$$|J_{\text{arrastre}}| = |J_{\text{difusión}}|.$$

Los h^+ que viajan desde $p \rightarrow n$ provienen mayoritariamente de la ionización de las impurezas aceptoras en el lado p y, análogamente, los e^- desde $p \leftarrow n$, de la ionización de las impurezas donadoras en el lado n . Tal como muestra la Fig. 8.1, este desplazamiento de portadores de carga, dejando tras de sí un *defecto* de carga *fija*, provoca la aparición de una región de carga neta en las proximidades de la unión. Esta región de carga neta, o **región de carga espacial/región de transición**, está compuesta por cierta cantidad de cargas negativas fijas en el lado p y la misma cantidad de cargas positivas en el lado n . El campo electrostático interno se genera debido a la aparición de estas cargas y es importante señalar que

el campo electrostático está básicamente localizado en la región de carga espacial,

dado que fuera de esta región el resto de la muestra es *neutro* dando así lugar a que el campo apenas se extienda más allá de la zona de transición. La existencia de dicho campo electrostático viene lógicamente

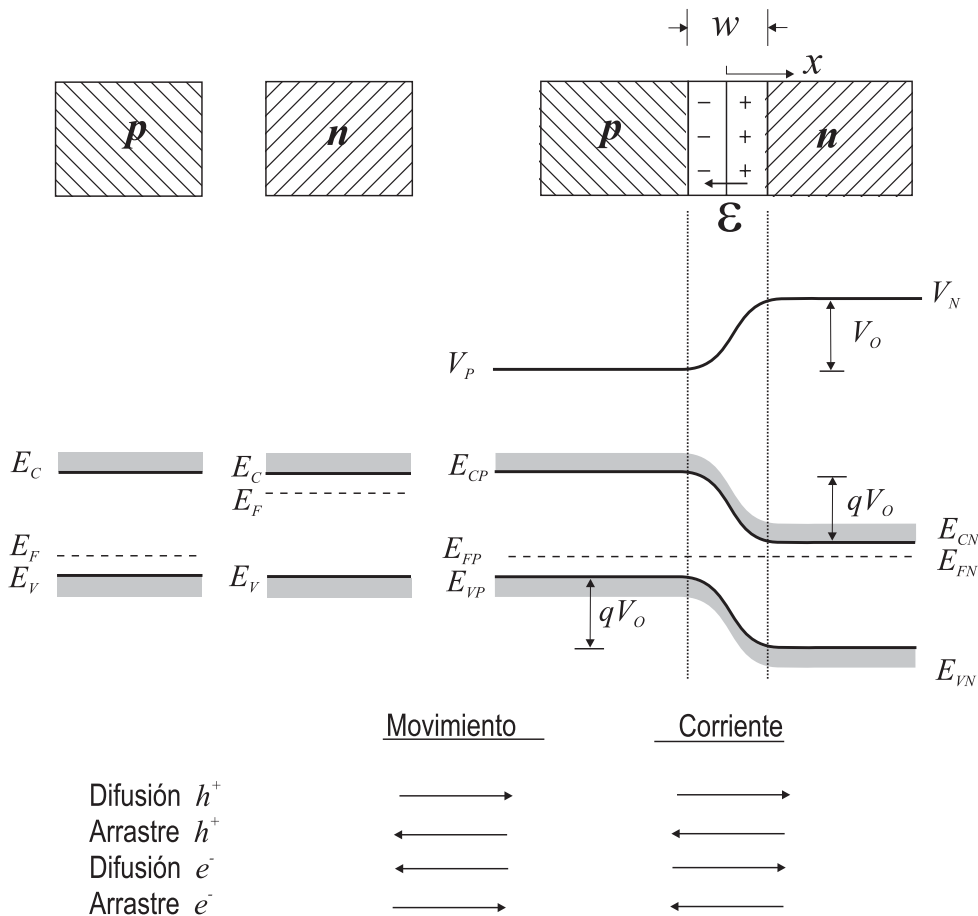


FIGURA 8.1: Propiedades de la unión p-n en equilibrio

acompañado de la aparición de una diferencia de potencial correspondiente, de tal modo que el potencial toma un valor V_n en la zona neutra n y V_p en la zona neutra p ; siendo su diferencia $V_0 = V_n - V_p$ conocida como **potencial de contacto**¹.

El cálculo del potencial de contacto puede realizarse, por ejemplo, siguiendo la expresión (7.42), que nos decía que

$$V_{21} = -\frac{kT}{q} \ln \frac{p_2}{p_1}$$

donde hemos hecho uso ahora de una notación ligeramente diferente al llamar q al módulo de la carga del electrón y $k \equiv k_B$. Teniendo en cuenta además la siguiente nomenclatura:

$$V_2 \equiv V_n, \quad V_1 \equiv V_p, \quad V_{21} \equiv V_n - V_p = V_0$$

$$p_1 \equiv p_{p0} \quad \text{y} \quad p_2 \equiv p_{n0},$$

donde el subíndice n o p indica la región de la unión y el subíndice "0" que se está en situación de equilibrio, la expresión anterior puede

¹Un voltímetro no podría medir este potencial de contacto puesto que el campo que lo crea sólo existe en el interior de la muestra, no extendiéndose por el exterior.

reescribirse como

$$V_0 = \frac{kT}{q} \ln \frac{p_{p0}}{p_{n0}}. \quad (8.1)$$

En aquellos casos en los que

$$p_{p0} \approx N_A \quad \text{y} \quad p_{n0} \approx \frac{n_i^2}{N_D},$$

la expresión para el potencial de contacto vendrá dada por

Potencial de contacto en una
unión p-n.

$$V_0 = \frac{kT}{q} \ln \frac{N_A N_D}{n_i^2}. \quad (8.2)$$

Para obtener el diagrama de bandas de energía de la unión p-n mostrado en la Fig. 8.1 se ha hecho uso de las siguientes consideraciones:

- El nivel de Fermi de una muestra en equilibrio no depende de la posición (ver Apéndice E).
- La energía de los electrones y/o huecos en cada zona de la unión estará afectada por la presencia del potencial electrostático.

Teniendo en cuenta además que p_{p0} y p_{n0} representan la concentración de huecos en equilibrio en los lados p y n fuera de la región de carga, obtendremos haciendo uso de (7.9), que

$$\frac{p_{p0}}{p_{n0}} = \frac{N_V \exp\left(-\frac{E_{Fp} - E_{Vp}}{kT}\right)}{N_V \exp\left(-\frac{E_{Fn} - E_{Vn}}{kT}\right)}.$$

Dado que según (8.1),

$$\frac{p_{p0}}{p_{n0}} = \exp\left(\frac{qV_0}{kT}\right) \quad (8.3)$$

y que $E_{Fp} = E_{Fn}$ en equilibrio, encontramos que

$$\exp\left(\frac{qV_0}{kT}\right) = \exp\left(-\frac{E_{Fp} - E_{Vp}}{kT}\right) \exp\left(-\frac{E_{Fn} - E_{Vn}}{kT}\right),$$

lo que nos lleva a

Desplazamiento de las bandas
de energía en una unión p-n
en equilibrio

$$E_{Vp} - E_{Vn} = qV_0. \quad (8.4)$$

(Una expresión análoga podría obtenerse para la energía de las bandas de conducción.) Tal como muestra la Fig. 8.1, la expresión (8.4) indica que las bandas de energía en cada lado de la unión están separadas una cantidad igual al valor del potencial de contacto por el de la carga electrónica q .

8.2.2. Región de carga espacial

En la región de carga espacial tanto los electrones como los huecos están en tránsito debido a la acción del campo electrostático $\mathcal{E}$. Este hecho provoca que existan, en un instante dado, muy pocos electrones o huecos en esta región. En consecuencia,

la carga espacial de la región de transición puede considerarse debida únicamente a las impurezas donadoras/aceptoras fijas ionizadas.

Consideraremos, por tanto, que no hay portadores de carga libres en esta región. El cálculo de la carga neta en ambos lados de la región de transición debe tener sólo en cuenta la concentración de impurezas ionizadas, esto es,

$$Q^{(+)} = qN_D S x_{n0} \quad \text{y} \quad Q^{(-)} = -qN_A S x_{p0} .$$

Dado que el semiconductor era originalmente neutro, debe verificarse que $Q^{(+)} = |Q^{(-)}|$, lo que implica que

$$qN_D S x_{n0} = qN_A S x_{p0} \quad (8.5)$$

y por tanto

$$N_D x_{n0} = N_A x_{p0} . \quad (8.6)$$

Esta expresión nos dice que las distancias de las zonas de carga espacial positiva y negativa son las mismas únicamente si $N_D = N_A$. A medida que la concentración de impurezas en una de estas zonas aumente, la longitud de esta zona disminuye.

Si la anchura de la zona de carga espacial se denomina

$$w = x_{n0} + x_{p0} , \quad (8.7)$$

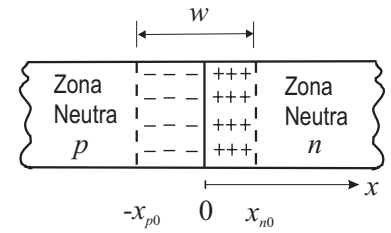
la resolución de la ecuación de Poisson para el potencial electrostático nos proporcionaría la siguiente expresión:

$$w = \left[\frac{2\epsilon V_0}{q} \left(\frac{1}{N_A} + \frac{1}{N_D} \right) \right]^{1/2} . \quad (8.8)$$

EJEMPLO 8.1 En una muestra de Si dopada para formar una unión abrupta p-n con $N_A = 4 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$, $N_D = 10^{16} \text{cm}^{-3}$ y $\epsilon = 12\epsilon_0$ calcule a) el potencial de contacto, b) la anchura de la región de carga espacial en cada lado de la unión, y c) el valor máximo del campo interno.

a) Usando la expresión (8.2) obtenemos que el potencial de contacto será

$$V_0 = \frac{kT}{q} \ln \frac{N_A N_D}{n_i^2} \approx 0,85 \text{ V} .$$



- b) Para calcular la anchura de la región de carga espacial hacemos uso de (8.8), lo que nos dice que

$$w = \left[\frac{2(12 \cdot 8,85 \times 10^{-12})(0,85)}{1,6 \times 10^{-19}} \left(\frac{1}{4 \times 10^{24}} + \frac{1}{10^{22}} \right) \right]^{1/2} \approx 0,334 \mu\text{m}.$$

Combinando ahora (8.6) con (8.7) obtendremos finalmente que

$$x_{n0} = 0,333 \mu\text{m} \quad , \quad x_{p0} = 8,3 \text{ \AA}.$$

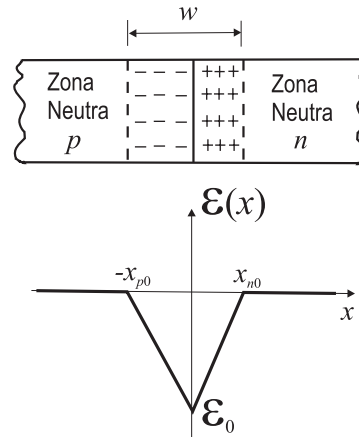
- c) Para calcular el valor máximo del campo interno partimos de (7.39), ecuación de Poisson, escrita para el campo, es decir

$$\frac{d\mathcal{E}(x)}{dx} = \frac{\rho(x)}{\epsilon},$$

que en la región de carga espacial se convierte en

$$\begin{aligned} \frac{d\mathcal{E}(x)}{dx} &= \frac{qN_D}{\epsilon} & 0 < x < x_{n0} \\ \frac{d\mathcal{E}(x)}{dx} &= -\frac{qN_A}{\epsilon} & -x_{p0} < x < 0. \end{aligned}$$

Integrando las anteriores ecuaciones y llamando $\mathcal{E}(0^-) = \mathcal{E}(0^+) \equiv \mathcal{E}_0$ obtenemos la siguiente forma para el campo eléctrico:



donde podemos observar que

$$\mathcal{E}_0 = -\frac{q}{\epsilon} N_D x_{n0} = -\frac{q}{\epsilon} N_A x_{p0}.$$

Al sustituir en la expresión anterior los valores correspondientes tendremos que

$$\mathcal{E}_0 = -\frac{1,6 \times 10^{-19}}{(12)(8,85 \times 10^{-12})(10^{22})(3,33 \times 10^{-5})} = 5,1 \times 10^6 \text{ V/m}.$$

8.3. Unión p-n polarizada

Una de las conclusiones más importantes que obtendremos en este apartado es el comportamiento asimétrico que presenta la unión p-n cuando ésta es polarizada directamente (cuando la zona p está sometida a un potencial externo positivo respecto a la zona n) o bien inversamente. Esta asimetría en el comportamiento de la característica $I \leftrightarrow V$ implica que la corriente puede fluir casi libremente cuando la unión se polariza directamente y apenas fluye en polarización inversa. Tal como muestra la Fig. 8.2, una muestra de semiconductor dopado homogéneamente mostraría un comportamiento claramente recíproco mientras que la unión p-n muestra un evidente comportamiento **no recíproco**.

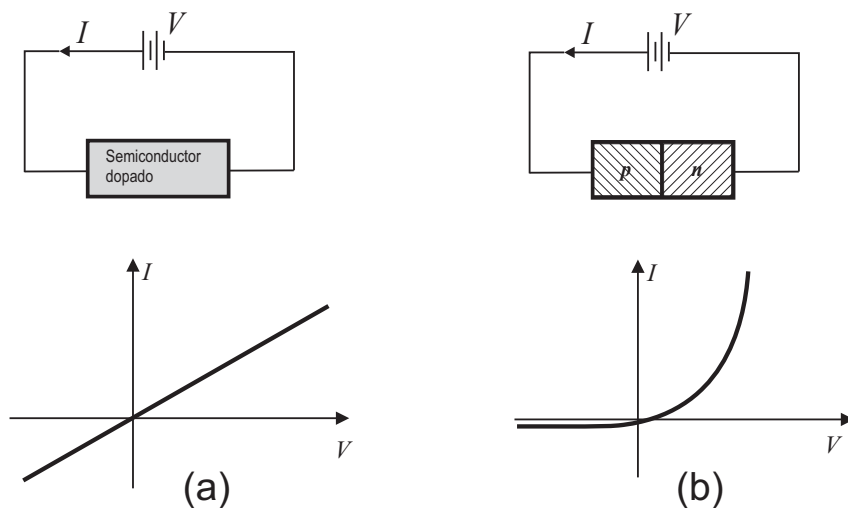


FIGURA 8.2: Característica $I \leftrightarrow V$ para (a): una muestra de semiconductor dopado homogéneamente; y (b): una unión p-n.

El análisis del efecto de la aplicación de un potencial externo a la unión se realizará, en primer lugar, mediante una descripción cualitativa para ver cómo varían las corrientes en la unión y posteriormente se hará un cálculo explícito de estas corrientes.

8.3.1. Descripción cualitativa de las corrientes en la unión

Para llevar a cabo este análisis, supondremos que

- Se ha llegado a una **situación estacionaria**.
- Todo el *voltaje aplicado* al sistema aparece únicamente en la región de carga espacial asociada a la unión.
- Las caídas de voltaje y los campos eléctricos en el material que se encuentra fuera de la región de la unión (esto es, las zonas neutras) son despreciables.

La suposición de que el efecto del voltaje externo aplicado a la unión aparezca únicamente en la región de transición es una aproximación puesto que, en sentido estricto, debe existir una caída de potencial en las zonas neutras si hay un flujo de carga a través de dichas regiones. No obstante, la resistencia de estas regiones neutras será muy pequeña en comparación con la resistencia de la región de carga espacial debido a la enorme diferencia en la concentración de portadores de carga existentes en ambas zonas (la zona de transición se ha supuesto despoblada de portadores de carga, es decir, con muy bajos valores de n o p , lo que hace que la conductividad de esta zona sea mucho menor que la de las zonas neutras). Este hecho provoca que la diferencia de potencial en las zonas neutras pueda despreciarse en la práctica respecto a la diferencia de potencial en la zona de transición.

El voltaje externo aplicado afectará a la barrera de potencial en la unión y, en consecuencia, al campo eléctrico en el interior de la región de transición. Debido a ello es de esperar cambios en las diversas componentes de los flujos de corriente en la unión. Evidentemente, estos cambios se reflejarán en una distinta configuración de bandas para la unión y en un cambio en la anchura de zona de carga espacial (ver Fig. 8.3).

A continuación analizaremos los cambios en las diversas magnitudes debido a una polarización externa:

- **Altura de la barrera de potencial.**

El potencial de contacto de equilibrio se verá afectado por la diferencia de potencial aplicada externamente de manera que la altura de la barrera de potencial resultante

- en *polarización directa*, $V = V_f$, disminuye para tomar el valor $V_0 - V_f$,
- en *polarización inversa*, $V = -V_r$, aumenta y se hace $V_0 + V_r$.

- **Campo eléctrico en la región de transición.**

En concordancia con los cambios en la altura de la barrera de potencial, el campo eléctrico en la región de transición

- disminuye en polarización directa,
- aumenta en polarización inversa.

- **Anchura de la región de transición.**

Dado que el campo eléctrico proviene de las cargas *fijas* descompensadas que aparecen en la región de transición y puesto que las concentraciones de impurezas no cambian en cada lado de la unión, los cambios en la magnitud del campo eléctrico deben ir acompañados de cambios en la anchura de la región de transición de modo que ésta

- disminuye en polarización directa,

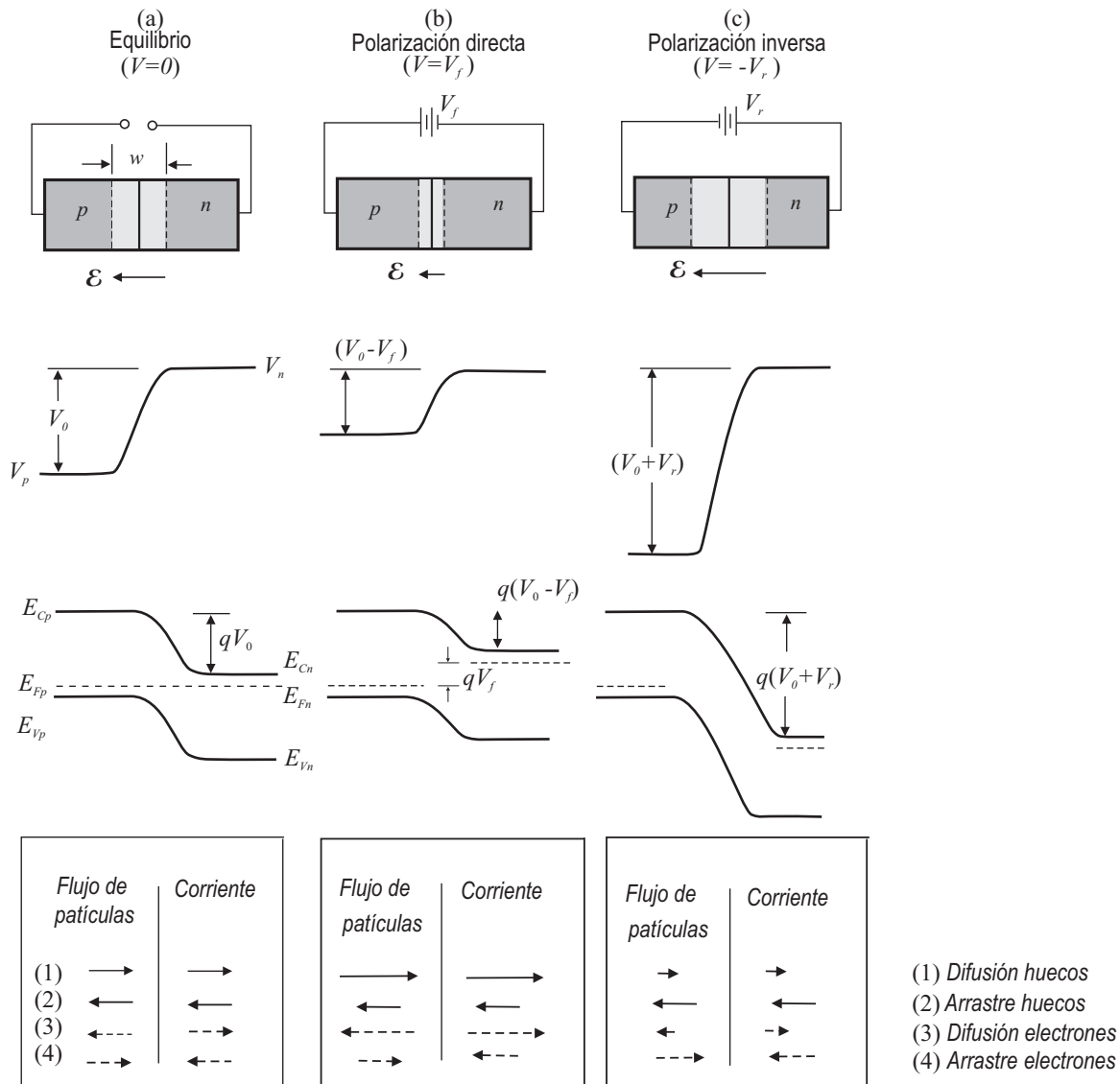


FIGURA 8.3: Efecto de la polarización externa sobre la unión p-n.

- aumenta en polarización inversa.

■ Separación de las bandas de energía.

Puesto que el valor de la altura de la barrera de energía para los electrones es simplemente su carga multiplicada por la altura de la barrera de potencial electrostático, tendremos que la separación entre bandas viene dada por

- en polarización directa: $q(V_0 - V_f)$,
- en polarización inversa: $q(V_0 + V_r)$.

Los efectos de la polarización se localizan básicamente en la región de transición y sus proximidades, por lo que en el interior de cada región neutra la posición *relativa* del nivel de Fermi en el diagrama de bandas se mantiene igual que en el equilibrio. En

consecuencia, el desplazamiento de las bandas de energías por efecto del potencial externo aplicado provocará una separación equivalente en los niveles de Fermi para cada lado de la unión, es decir

$$E_{Fn} - E_{Fp} = qV . \quad (8.9)$$

■ Corrientes de difusión.

En equilibrio, el campo eléctrico interno se establecía de modo que su efecto contrarrestaba exactamente la corriente de difusión. En la situación de no equilibrio impuesta por la polarización externa encontramos que

- *Polarización directa:*
al disminuir el campo eléctrico en la región de transición, este campo ya no puede contrarrestar totalmente las corrientes de difusión, de modo que se iniciará un flujo de h^+ de $p \rightarrow n$ y otro análogo de e^- de $p \leftarrow n$. (Estas corrientes de difusión se mantendrán en el tiempo debido al efecto de la batería).
- *Polarización inversa:*
el campo en la región de transición aumentaba por lo que las corrientes de difusión serán en este caso aminoradas.

■ Corrientes de arrastre.

Aunque pudiera parecer un poco sorprendente,

las corrientes de arrastre son relativamente insensibles a las variaciones en la altura de la barrera de potencial.

El hecho de que la corriente de arrastre en la unión sea despreciable respecto a la difusión en la unión puede entenderse si notamos que dicha corriente de arrastre proviene de los portadores *minoritarios* que llegan a la región de transición y que son barridos por el campo en esta región. En concreto, esta corriente estará mantenida por e^- que viajan desde $p \rightarrow n$ y por h^+ de $p \leftarrow n$ (por ejemplo, electrones del lado p que por difusión aparecen en la región de transición y son barridos por el campo llegando a la zona n). Dado que la concentración de portadores minoritarios proviene de la generación de pares e^- / h^+ (en el presente caso únicamente por efecto de la excitación térmica) y ésta no se ve afectada por el potencial externo aplicado, puede deducirse que esta corriente de minoritarios depende básicamente de la velocidad de generación de pares e^- / h^+ en las zonas respectivas y apenas del voltaje exterior². Por este motivo, esta corriente de arrastre de minoritarios también se conoce como *corriente de generación*.

²Este hecho también puede verse como que el campo es capaz de barrer *todos* los portadores minoritarios que llegan a la unión y el ritmo de aparición de estos porta-

■ Corriente Total.

La Fig. 8.3 muestra que la corriente total es la suma de las corrientes de difusión, que se producen desde $p \rightarrow n$, más las de arrastre, cuyo sentido es desde $p \leftarrow n$. Dado que ambas corrientes han sido analizadas anteriormente, tendremos para la corriente total que

- *Polarización inversa:*

Corriente de difusión disminuye considerablemente (se hace prácticamente despreciable). La única corriente que queda es la relativamente pequeña corriente de generación en el sentido $p \leftarrow n$.

- *Polarización directa:*

La corriente de difusión ($p \rightarrow n$) es ahora claramente favorecida mientras que la corriente de arrastre ($p \leftarrow n$) apenas varía. Esto da lugar a un incremento considerable de la corriente total en el sentido $p \rightarrow n$.

Nótese que la corriente de difusión en polarización directa puede crecer indefinidamente mientras que esta corriente en polarización inversa sólo puede disminuir hasta hacerse nula.

8.3.2. Ecuación del diodo. Cálculo simplificado

En este apartado llevaremos a cabo un cálculo simplificado de la ecuación del diodo a partir de ciertos razonamientos cualitativos. Para ello notemos en primer lugar que la concentración de minoritarios en cada lado de la unión p-n variará con el voltaje aplicado debido al efecto de éste en la difusión de portadores a través de la unión. En el equilibrio, la relación entre las concentraciones de h^+ a ambos lados de la unión viene dada por (8.3), esto es,

$$\frac{p_{p0}}{p_{n0}} = e^{qV_0/kT}.$$

Al aplicar una tensión externa, V , la altura de la barrera de potencial varía desde $V_0 \rightarrow V_0 - V$. Considerando que el efecto de este potencial externo no varía la relación anterior para cada tipo de portadores en los extremos de la región de transición, todavía podemos escribir para las concentraciones, justo en los límites de las zonas neutras con la zona de transición, que

$$\frac{p_p(-x_{p0})}{p_n(x_{n0})} = e^{q(V_0 - V)/kT}. \quad (8.10)$$

En situaciones de **inyección débil**, la concentración de mayoritarios apenas variará con el voltaje aplicado [$p_p(-x_{p0}) \approx p_{p0}$], luego (8.10)

dores en la unión apenas se ve afectado por V . Ciertamente, cálculos más rigurosos demuestran que, en la región de transición, la corriente de arrastre es mucho menor que la de difusión para valores de polarización directa no demasiado elevados.

podrá reescribirse como

$$\frac{p_p(-x_{p0})}{p_n(x_{n0})} = \frac{p_{p0}}{p_n(x_{n0})} = e^{qV_0/kT} e^{-qV/kT},$$

que, teniendo en cuenta (8.3), al agrupar términos encontramos

Concentración de minoritarios en el borde de la región de transición del lado n

$$p_n(x_{n0}) = p_{n0} e^{qV/kT}. \quad (8.11)$$

La expresión anterior nos indica que la concentración de *minoritarios* sufre un fuerte incremento (exponencial) en polarización directa respecto a la que existía en equilibrio. En polarización inversa ($V < 0$), la concentración sufriría igualmente una disminución muy considerable. Dado que hemos comprobado que un voltaje aplicado, V , incrementa la probabilidad de que un portador se pueda difundir a través de la unión en un factor dado por $\exp(qV/kT)$, esto nos permite suponer que la corriente de difusión presentará similarmente una dependencia con respecto al voltaje aplicado del tipo

$$I_{\text{dif}} = I_{0,\text{dif}} e^{qV/kT} \quad (8.12)$$

(lo que en última instancia provoca que el diodo presente un comportamiento claramente **no recíproco** en su característica $I \leftrightarrow V$, tal como muestra la Fig. 8.2).

Puesto que en equilibrio ($V = 0$) la corriente total es cero debido a que la corriente de difusión ($I_{0,\text{dif}}$) y la de generación (I_{gen}) se cancelan, encontramos que

$$I(V = 0) = I_{0,\text{dif}} - |I_{\text{gen}}| = 0, \quad (8.13)$$

lo que nos permite escribir que

$$I_{0,\text{dif}} = |I_{\text{gen}}| \equiv I_0. \quad (8.14)$$

Al expresar la corriente en la unión p-n polarizada ($V \neq 0$) como

$$I = I_{\text{dif}} - |I_{\text{gen}}|, \quad (8.15)$$

y hacer uso de (8.12) y (8.14), obtenemos finalmente que

$$I = I_0 (e^{qV/kT} - 1). \quad (8.16)$$

Inyección de portadores. Cálculo riguroso ecuación del diodo

Para calcular de una forma más rigurosa la corriente total en la unión p-n deberemos obtener primero las corrientes de difusión en los límites de la zona de carga espacial con las zonas neutras. Las corrientes de difusión se obtendrán como el gradiente de la concentración de *minoritarios* pues supondremos que el gradiente de la concentración de mayoritarios es despreciable. Para obtener la concentración

de minoritarios en las zonas neutras deberemos resolver la ecuación de continuidad que, en el presente caso, se reducirá a la resolución de la ecuación de difusión (cuestión tratada en el Apartado 7.7.1).

Según nos ha mostrado la expresión (8.11), la polarización directa provoca una *inyección constante de minoritarios en exceso*, esto es, h^+ en la zona neutra n y e^- en la zona neutra p . La concentración de h^+ en exceso en el borde de la región de transición con la zona neutra n vendrá entonces dada por

$$\Delta p_n = p_n(x_{n0}) - p_{n0} = p_{n0} (e^{qV/kT} - 1) \quad (8.17)$$

y similarmente para e^- en el lado p ,

$$\Delta n_p = n_p(x_{p0}) - n_{p0} = n_{p0} (e^{qV/kT} - 1) . \quad (8.18)$$

Esta situación de inyección constante de minoritarios fue ya estudiada en el Apartado 7.7.2, donde vimos que daba lugar a una difusión de estos minoritarios hasta que se recombinaban. Para el presente caso tendremos que

$$\delta p_n(x_n) = \Delta p_n e^{-x_n/L_p} = p_{n0} (e^{qV/kT} - 1) e^{-x_n/L_p} \quad (8.19a)$$

$$\delta n_p(x_p) = \Delta n_p e^{-x_p/L_n} = n_{p0} (e^{qV/kT} - 1) e^{-x_p/L_n} , \quad (8.19b)$$

originando así la distribución de portadores minoritarios en cada lado de la unión mostrada en la Fig. 8.4 (notar que x_n y x_p se toman positivos al introducirse en las regiones neutras n y p respectivamente).

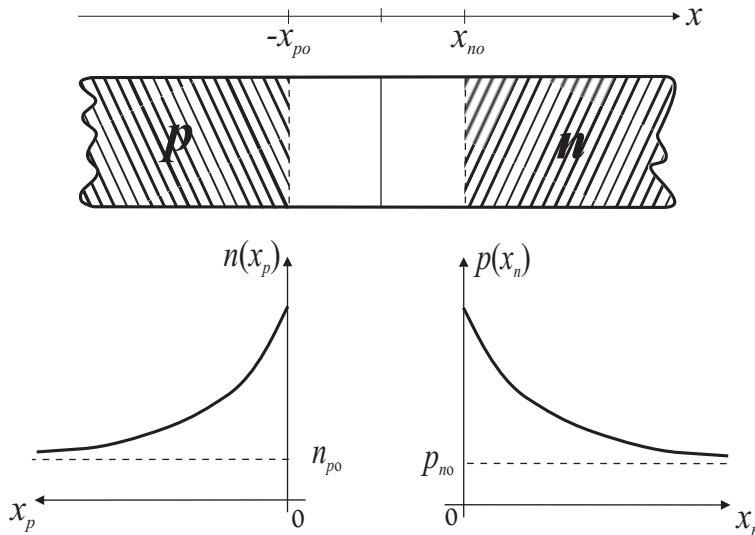


FIGURA 8.4: Distribución de portadores minoritarios en cada lado de la unión.

La corriente de difusión de h^+ en la zona neutra n puede calcularse a partir de la expresión (7.56), multiplicando ésta por el área, S , de la

sección transversal, para obtener

$$I_p^{\text{dif}}(x_n) = -qSD_p \frac{d\delta p_n(x_n)}{dx_n} = qS \frac{D_p}{L_p} \delta p_n(x_n), \quad (8.20)$$

lo que nos indica que la corriente de difusión de h^+ en cada punto x_n será proporcional a la concentración de h^+ en exceso en dicho punto.

Dado que en el límite de la región de transición con la zona neutra n ($x_n = 0$) el campo eléctrico es nulo, la corriente total de huecos puede identificarse en este punto con la corriente de difusión. Ello nos permite calcular $I_p(x_n = 0)$ a partir de la corriente inyectada en el lado n a través de la unión, que según (8.20) vendrá dada por

$$I_p(x_n = 0) \equiv I_p^{\text{dif}}(x_n = 0) = \frac{qSD_p}{L_p} \Delta p_n = \frac{qSD_p}{L_p} p_{n0} \left(e^{qV/kT} - 1 \right). \quad (8.21)$$

Análogamente, la corriente de electrones inyectada en el lado p será

$$I_n(x_p = 0) = \frac{qSD_n}{L_n} n_{p0} \left(e^{qV/kT} - 1 \right). \quad (8.22)$$

Si se supone despreciable la recombinación en la región de transición, los e^- que se inyectan al lado p ($x_p = 0$) deben haber atravesado la superficie situada en $x_n = 0$. Debido a este hecho, la corriente total que cruza la unión en $x_n = 0$ puede escribirse como

$$\begin{aligned} I &= I_p(x_n = 0) + I_n(x_p = 0) \\ &= qS \left(\frac{D_p}{L_p} p_{n0} + \frac{D_n}{L_n} n_{p0} \right) \left(e^{qV/kT} - 1 \right). \end{aligned}$$

Dado que la corriente total debe ser constante a través del dispositivo (al no haber generación ni acumulación de carga neta), la expresión anterior nos proporciona justamente la corriente total para cada punto de la unión p-n,

Ecuación del diodo

$$I = I_0 \left(e^{qV/kT} - 1 \right), \quad (8.23)$$

donde I_0 se conoce como *corriente inversa de saturación* y tiene por valor

$$I_0 = qS \left(\frac{D_p}{L_p} p_{n0} + \frac{D_n}{L_n} n_{p0} \right).$$

La ecuación (8.23), válida tanto para tensiones aplicadas positivas o negativas, dice que, en polarización directa, la corriente $p \rightarrow n$ crece exponencialmente con la tensión aplicada mientras que en polarización inversa ($V \ll 0$) tendremos una pequeña corriente en sentido $p \leftarrow n$ de valor $I \approx I_0$. Claramente, la curva $I \leftrightarrow V$ mostrada en la Fig. 8.2(b) es una representación gráfica de esta ecuación.

Corrientes de portadores mayoritarios y minoritarios

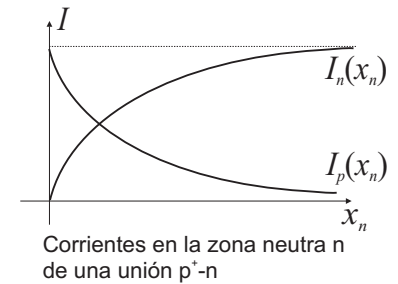
La corriente del diodo según (8.23) fue calculada considerando únicamente la corriente de difusión de minoritarios³ dado que se supuso despreciable la corriente de arrastre de minoritarios en las zonas neutras. Por tanto, la corriente dada por (8.20) representaba la corriente de minoritarios (huecos) en la zona neutra n , es decir,

$$I_p(x_n) = \frac{qSD_p}{L_p} \Delta p_n e^{-x_n/L_p}. \quad (8.24)$$

En el caso de una unión p^+-n ($N_A \gg N_D$), la corriente *total* en $x_n = 0$ proviene mayoritariamente de la corriente de difusión de huecos en ese punto, puesto que según (8.21) y (8.22), $I_n(x_n = 0) \ll I_p(x_n = 0)$ al ser $n_{p0} \ll p_{n0}$. Dado que la corriente total, I , debe ser constante en cualquier punto, la corriente de mayoritarios (electrones) en la zona neutra n vendrá entonces dada por

$$I_n(x_n) = I - I_p(x_n). \quad (8.25)$$

Lejos de la unión, la corriente en la zona neutra n es mantenida casi exclusivamente por e^- . Estos e^- deben fluir desde dentro de la región neutra hacia la unión para restituir aquellos e^- que se recombinaron con los h^+ en exceso y para proporcionar la inyección de e^- a la zona p . En última instancia, el suministro de estos e^- lo realiza la batería.



8.4. Láser Semiconductor

La idea inicial de realizar un láser usando materiales semiconductores parece que fue propuesta de forma esquemática por J. von Neumann en 1953. Posteriormente Basov en 1961 llevó a cabo un desarrollo teórico más completo que finalmente redundó en la realización del primer láser semiconductor funcionando a 77K por R.N. Hall en 1962. El primer láser semiconductor a temperatura ambiente fue realizado en el año 1970 por varios grupos rusos y en los ATT Bell Laboratories.

El láser semiconductor suele denominarse **diodo láser** debido a que se basa en las propiedades físicas de la unión $p-n$, al igual que los diodos de rectificación eléctrica vistos anteriormente. También se conocen estos láseres con el nombre de **láseres de inyección** debido a que el procedimiento de bombeo más usado es la “inyección” de portadores en la unión $p-n$.

³Es interesante notar que I_0 es justamente la magnitud de la corriente de difusión que existía en equilibrio. Esta corriente de difusión de equilibrio era justamente igual a la corriente de arrastre en equilibrio, lo cual nos permitiría interpretar (8.23) considerando que $I_0 e^{qV/kT}$ es la corriente de difusión y I_0 la corriente de generación (que no dependía del voltaje aplicado).

8.4.1. Propiedades eléctricas

Conviene recordar algunas propiedades de los semiconductores que son relevantes en el contexto del laser de inyección:

► Tal como se comentó en el Apartado 6.2, la estructura de bandas de energía de un semiconductor es aproximadamente como se representa en la Fig. 8.5, donde se muestran los dos casos usuales de semiconduc-

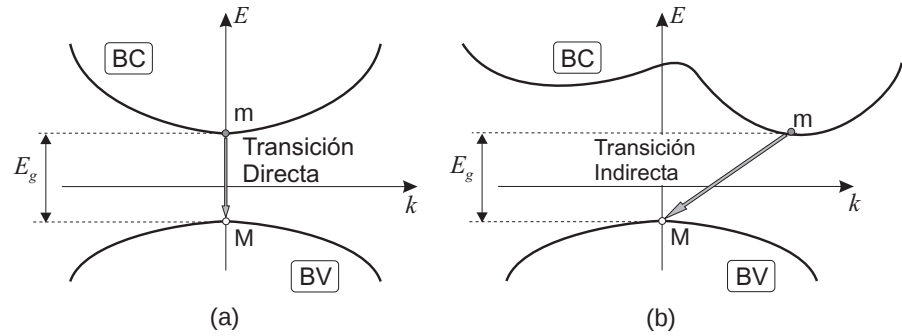


FIGURA 8.5: Esquema energético de bandas realista de (a): un semiconductor directo y (b) un semiconductor indirecto.

tor directo (por ejemplo: GaAs) y semiconductor indirecto (Si, Ge...).

En un semiconductor directo, un electrón puede realizar una transición energética desde el punto más bajo de la BC al punto más alto de la BV sin que ello implique un cambio significativo en su momento. Por el contrario, en un semiconductor indirecto, la anterior transición requeriría un cambio importante de momento. En una estructura periódica de periodo espacial a (típicamente $a \sim 1\text{\AA}$), el mayor cambio de momento permitido sería

$$p_{\max} \sim \frac{h}{2a}.$$

Por otra parte, teniendo en cuenta el valor del momento, $p_f = h/\lambda$, de un fotón luminoso ($\lambda \sim 10^4\text{\AA}$), encontramos la siguiente relación:

$$\frac{p_f}{p_{\max}} \sim \frac{2a}{\lambda} \left(= 10^{-4} \right),$$

que nos indica que las diferencias de momento requeridas en una transición indirecta no pueden ser satisfechas únicamente por la participación de un fotón óptico. Debemos admitir entonces que la transición anterior debe realizarse con la participación conjunta de otro proceso que proporcione la cantidad de momento requerido (en concreto, participa un *fonón*, que puede verse como una oscilación colectiva de la red). Por el contrario, en el caso de una transición directa, los pequeños cambios de momento requeridos en el proceso sí pueden ser satisfechos únicamente por un fotón.

► Tal como se ha venido discutiendo en este tema, en la zona de transición de una unión p-n se igualan los niveles de Fermi de ambas regiones dando lugar a un potencial de contacto, según se muestra en la Figura 8.6(a). Si la anterior unión p-n se somete ahora a una fuente de

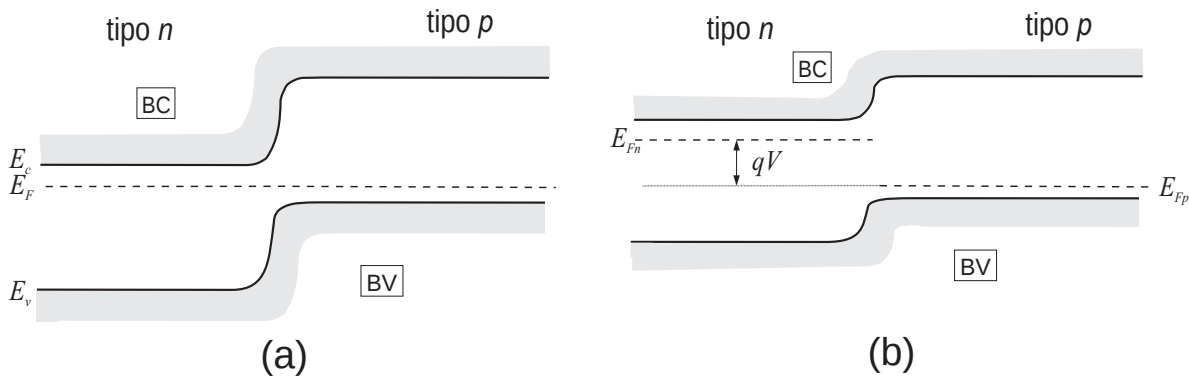


FIGURA 8.6: Esquema energético de la región de transición de una unión p-n (a): en equilibrio térmico y (b): sometida a una fuente de tensión externa que la polariza directamente.

tensión externa de modo que eleva el potencial del lado *p* con respecto al del lado *n*, lo que se denomina **polarización directa**, el esquema energético resultante puede verse en la Figura 8.6(b). En esta situación, los electrones del lado *n* se desplazarán hacia el lado *p* y análogamente huecos del lado *p* viajarán hacia el lado *n*. En consecuencia, electrones y huecos se encontrarán en la misma región espacial, siendo posible su **recombinación** mediante las transiciones directas/indirectas que antes se mencionaron (ver Figura 8.7).

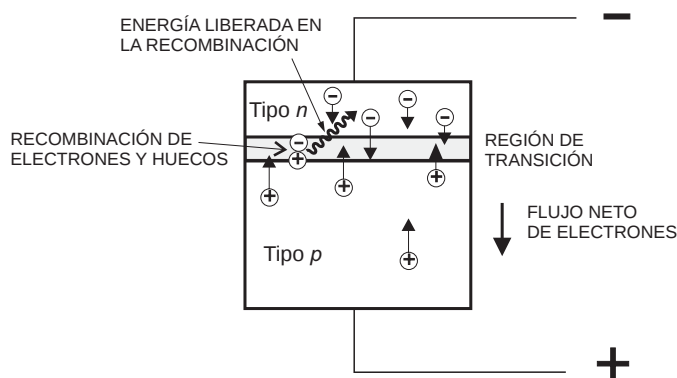


FIGURA 8.7: Flujo de portadores en un diodo semiconductor polarizado directamente.

Si en estas recombinaciones predomina la emisión espontánea, se tiene un **LED** (light emitting diode) y si por el contrario, predominan las emisiones estimuladas, se produce una **acción láser**.

Si en los semiconductores de la situación anterior se incrementan los niveles de dopaje, el efecto de las impurezas añadidas puede llegar

a distorsionar la estructura de bandas energéticas del semiconductor. En el caso de un incremento de impurezas donadoras, la presencia de numerosos electrones no localizados hace que el nivel de Fermi del semiconductor aparezca en el interior de la Banda de Conducción. En este caso el semiconductor se denomina **degenerado**. La Figura 8.8(a) muestra la situación energética a la que se llega en la región de tran-

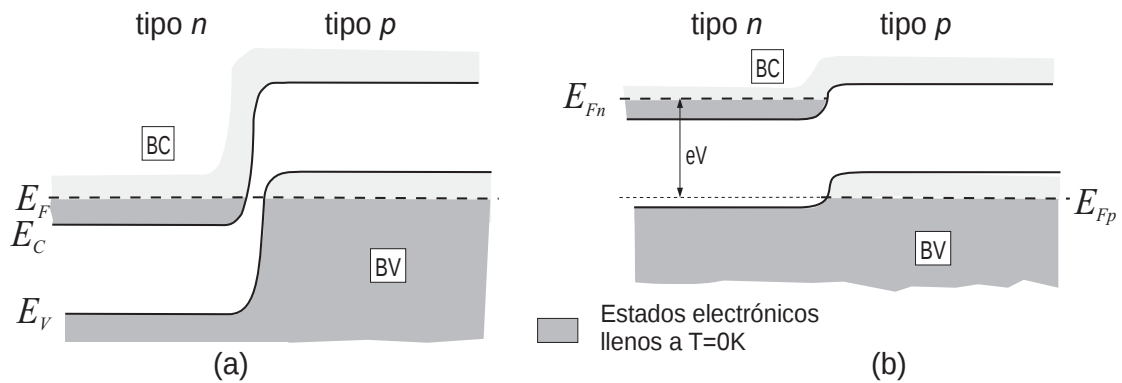


FIGURA 8.8: Esquema energético de la región de transición de una unión p-n degenerada (a): en equilibrio térmico y (b) polarizada directamente.

sición de una unión p-n degenerada en equilibrio térmico. Si a esta unión se le aplica una polarización directa, V , tal que $qV > E_g$, se llega a la situación mostrada en la Figura 8.8(b). Es importante notar que aunque estamos en una situación de no equilibrio térmico, lejos de la región de transición y dentro de cada banda, se establece rápidamente un cuasi-equilibrio térmico (esto es, la dinámica de los electrones fuera de la región de transición no es influenciada significativamente por el campo externo aplicado). Esto posibilita la descripción de los electrones en las bandas mediante la distribución de Fermi-Dirac y se puede, por tanto, seguir usando el parámetro *Energía de Fermi* como característico de esa banda.

8.4.2. Propiedades ópticas

La interacción de la radiación con los semiconductores está fundamentalmente determinada por la estructura de bandas que éstos posean. Así, en un semiconductor homogéneo

- La emisión se producirá en la forma de fotones de energía igual a la anchura energética de la banda prohibida, $h\nu = E_g$, dado que, dentro de cada banda, los electrones se mueven muy rápidamente hacia los niveles más bajos/altos disponibles en la banda de conducción/valencia. A este proceso se le denomina recombinación electron-hueco.
- La absorción de radiación puede producirse en un rango mucho más ancho de frecuencias, denominándose a este proceso generación de un par e^-/h^+ .

La recombinación de portadores más probable en un semiconductor que forma una unión p-n se produce cuando electrones y huecos se encuentran en la misma región espacial. Según se verá más adelante, para densidades de corriente moderadas, la radiación emitida tiene características de emisión espontánea y únicamente a partir de cierta intensidad umbral, I_U , se producirá emisión estimulada.

Dado que los procesos de emisión y absorción mediante recombinación o generación de pares e^-/h^+ pueden considerarse como procesos de interacción luz-materia, para que exista acción láser la cuestión es la siguiente:

¿Bajo qué condiciones la razón de emisión estimulada supera a la absorción en una unión p-n en polarización directa?

Dado que los procesos de interacción radiación-semiconductor ocurrirán predominantemente en la región de transición, los procesos involucrados se suponen asociados a transiciones entre un grupo de niveles del borde inferior de la Banda de Conducción y un grupo de niveles del borde superior de la Banda de Valencia (ver Figura 8.9).

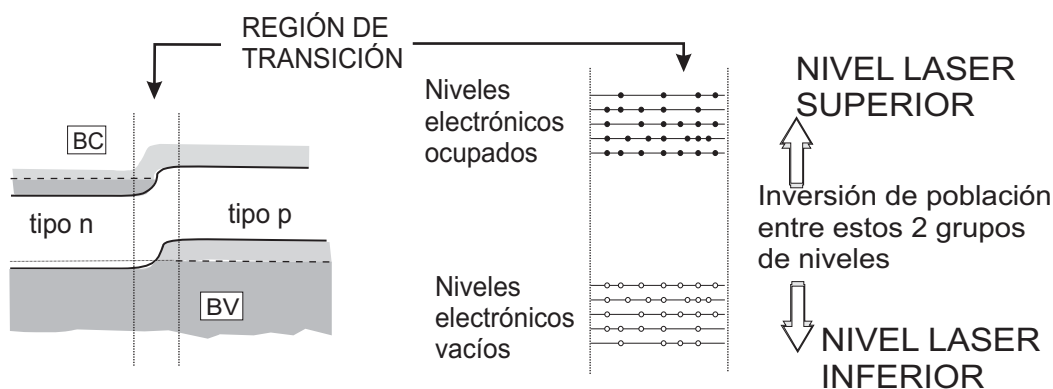


FIGURA 8.9: Niveles involucrados en la acción láser de una región de transición de una unión p-n degenerada.

Debemos considerar que para que exista absorción estimulada un electrón de BV tras tomar la energía de un fotón incidente transita un estado energético en la BC. No obstante, este proceso no sólo depende de la existencia de estados energéticos en la BC sino también de que estos estados estén vacíos, es decir, que no haya otros electrones ocupando ese estado. Así, los procesos de absorción estarán relacionados con la existencia de estados llenos en BV y vacíos en la BC mientras que los de emisión lo estarán con la existencia de estados llenos en BC y vacíos en BV. En concreto, las probabilidades de emisión y absorción estimulada estarán relacionadas con

1. la densidad de la radiación presente, $u(\nu)$;
2. la probabilidad de ocupación de los niveles de la banda de conducción, $f_c(E)$; y

3. la probabilidad de ocupación de los niveles de la banda de valencia, $f_v(E)$.

En este sentido se tiene que

- *Emisión estimulada*: proporcional al número de transiciones posibles entre los estados superiores llenos y los estados inferiores vacíos.
- *Absorción estimulada*: proporcional al número de transiciones posibles entre estados inferiores llenos y estados superiores vacíos.

La probabilidad de que un estado con energía E_2 en la Banda de Conducción esté *ocupado* y que un estado con energía E_1 en la Banda de Valencia esté *vacío* es

$$f_c(E_2) [1 - f_v(E_1)] \quad \text{o bien} \quad f_c(1 - f_v)$$

y por tanto el ritmo de transiciones de $E_2 \rightarrow E_1$ será

$$R_{2 \rightarrow 1} = B_{21} u(\nu) f_c(1 - f_v) . \quad (8.26)$$

Análogamente, el ritmo de transiciones de $E_1 \rightarrow E_2$ vendrá dado por

$$R_{1 \rightarrow 2} = B_{12} u(\nu) f_v(1 - f_c) . \quad (8.27)$$

Para que el ritmo de emisión estimulada supere a la absorción deberá ocurrir que $f_c(1 - f_v) > f_v(1 - f_c)$, que puede expresarse simplemente como

$$f_c(E_2) > f_v(E_1) , \quad (8.28)$$

esto es, la *probabilidad de ocupación* en el nivel de energía E_2 en BC debe ser mayor que la del estado E_1 en BV (nótese que esto nunca podría ocurrir en un semiconductor homogéneo intrínseco o extrínseco con cualquier nivel de dopaje ni tampoco en una unión p-n en equilibrio).

Dado que el tiempo de vida medio de los portadores es mucho mayor que el tiempo en que los electrones/huecos en ambas bandas alcanzan el equilibrio térmico, se supone que la probabilidad de ocupación de los niveles energéticos correspondiente a los electrones o huecos inyectados en la región de transición viene descrita por la estadística de Fermi-Dirac y por tanto

$$f_c^{-1} = 1 + \exp\left(\frac{E_2 - E_{Fn}}{kT}\right) \quad \text{y} \quad f_v^{-1} = 1 + \exp\left(\frac{E_1 - E_{Fp}}{kT}\right) .$$

En vista de la anterior expresión, la condición (8.28) viene dada por

$$\exp\left(\frac{E_2 - E_{Fn}}{kT}\right) < \exp\left(\frac{E_1 - E_{Fp}}{kT}\right) \quad (8.29)$$

que puede reducirse a

$$E_{Fn} - E_{Fp} > E_2 - E_1 . \quad (8.30)$$

La condición de *inversión de población* se da, por tanto, para aquellos niveles E_2 de BC y niveles E_1 de BV que satisfagan la condición (8.30), esto es, los niveles de BC por debajo de E_{Fn} y los niveles de BV por encima de E_{Fp} . Puesto que $E_2 - E_1$ es necesariamente mayor que la anchura de la banda energética, E_g , podemos concluir finalmente que la condición para que exista inversión de población en la región de transición de una unión p-n directamente polarizada es

$$E_{Fn} - E_{Fp} > E_g \quad (8.31)$$

Condición para que exista inversión de población

De todo lo expuesto anteriormente podemos concluir que la acción láser requiere :

1. *El semiconductor debe estar degenerado* (pues de otra manera la diferencia entre los niveles de Fermi de la zona p y la zona n nunca puede superar la anchura energética de la banda prohibida).
2. *La tensión de polarización debe exceder el valor E_g/e .*
3. *El semiconductor debe ser directo* (para que las posibles recombinaciones electrón–hueco se realicen con la mayor probabilidad de emisión de fotones).

A pesar de cumplir las condiciones anteriores, una seria limitación para la acción láser en los semiconductores es la **absorción de portadores libres**. Esto se debe a que la estructura de bandas del semiconductor permite que un electrón de la Banda de Conducción pueda interactuar con uno de los fotones emitidos de tal forma que el electrón pase a uno de los niveles superiores y vacíos de dicha banda. Este exceso de energía será posteriormente liberado en forma de calor, dándose de esta manera transiciones energéticas de valor $h\nu$ que pueden reducir considerablemente la densidad de emisión estimulada y por tanto dificultar la realimentación de la acción láser.

Según se indicó anteriormente, cuando la corriente de alimentación del diodo láser es pequeña, éste genera emisión espontánea, según el mismo proceso que la emisión de un LED. Sin embargo, al aumentar la corriente de alimentación (o análogamente la tensión de polarización hasta conseguir que se cumpla (8.31)), se alcanza un nivel umbral donde se invierte la población de electrones y comienza la acción láser. Este fenómeno puede observarse en la Figura 8.10 donde puede verse como por debajo de la corriente umbral, la intensidad luminosa proporcionada por el diodo es muy pequeña, disipándose la mayor parte de la potencia de entrada en calor. A partir del umbral de intensidad, aumenta considerablemente la eficiencia óptica del diodo, aunque debe tenerse en cuenta que si la intensidad umbral es alta, esto significa una considerable pérdida de potencia en calor para mantener la acción láser. Las investigaciones actuales en los diodos láser

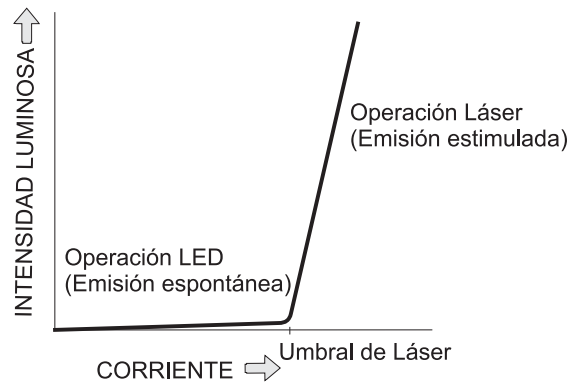


FIGURA 8.10: Potencia de salida de un láser semiconductor en función de la corriente de alimentación.

van encaminadas a reducir esta corriente umbral y así asegurar funcionamientos muy duraderos a temperatura ambiente.

8.4.3. Estructura del láser semiconductor

La acción láser eficiente requiere el uso de resonadores ópticos. En el caso del diodo láser horizontal y tal como se muestra en la Figura 8.11, la realimentación que concentra la emisión estimulada en el

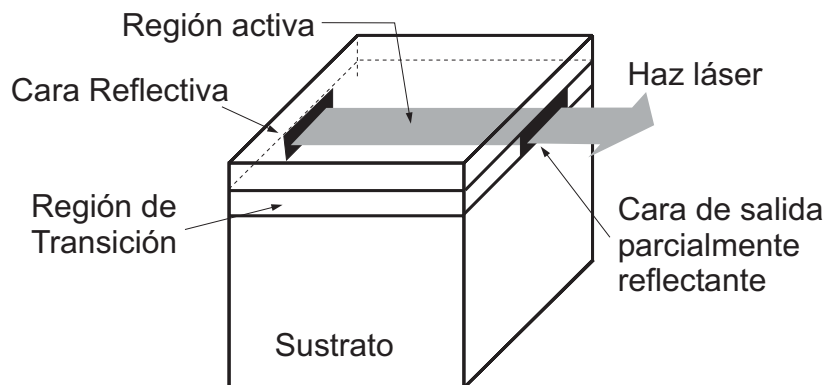


FIGURA 8.11: Las regiones reflectantes producen acción láser en el plano de la unión en un diodo láser

plano de la unión, proviene de los bordes pulidos del cristal semiconductor que actúan como espejos debido al alto índice de refracción de los semiconductores ($\sim 3 - 4$), que hace que estas caras pulidas reflejen aproximadamente el 30 % de la luz incidente.

Una de las características más determinantes en las propiedades del láser semiconductor es la estructura de las capas adyacentes a la capa activa (región de transición donde se realiza la acción láser). En los primeros diodos láser, todas las capas estaban construidas sobre la base del mismo material y por tanto se denominan **homoestructuras**. Posteriores desarrollos llevaron a la realización de láseres semi-

conductores en los que las capas adyacentes estaban construidas con distintos materiales, denominándose **heteroestructuras**. Algunas características relevantes de ambas son

■ **Homoestructuras:**

No proporcionan un confinamiento óptico óptimo ya que los índices de refracción de las diversas capas eran muy parecidos — ver Figura 8.12(a). Esto exigía unas densidades de corrientes um-

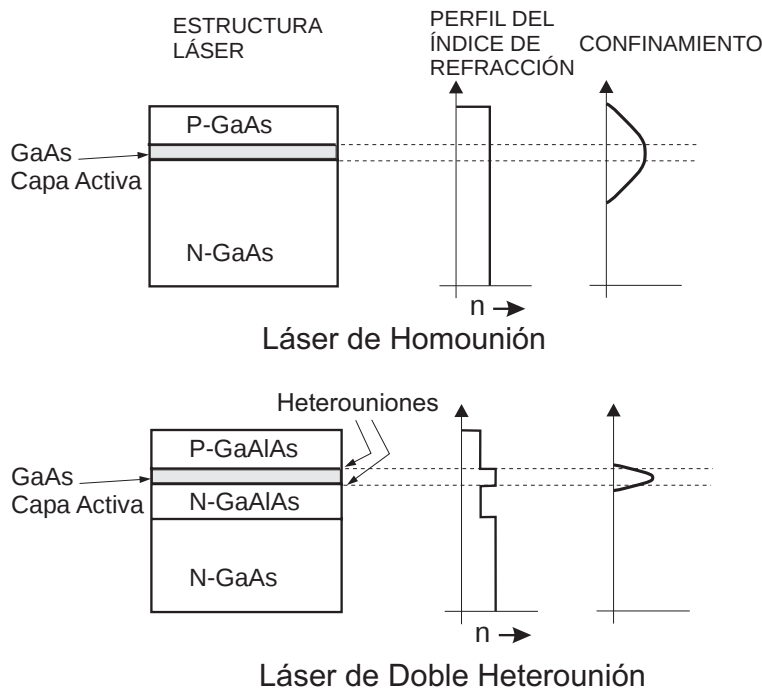


FIGURA 8.12: Láser de homounión y heterounión, señalando el perfil del índice de refracción y el confinamiento luminoso.

brales muy altas, $I_U / \text{cm}^2 \sim 50000 \text{ A} / \text{cm}^2$ que causaban muchas pérdidas por calor (lo cual exigía trabajar a temperaturas de Helio líquido, $T \sim 77 \text{ K}$) y una corta vida media de los dispositivos.

■ **Heteroestructuras:**

Las capas presentan distintos índices de refracción de forma que esto crea un efecto guía de onda (similar al de la fibra óptica) que confina la luz en la capa activa, según se muestra en la Figura 8.12(b). Además, si las capas adyacentes poseen bandas energéticas prohibidas de mayor anchura se reducirá sustancialmente la absorción por portadores libres. Este tipo de láseres puede ya funcionar en modo continuo a temperatura ambiente al ser $I_U / \text{cm}^2 \sim 2000 - 4000 \text{ A} / \text{cm}^2$, $I_U \sim 1,2 \text{ A}$.

El esquema con el que se realizan actualmente la mayoría de los diodos láser comerciales consiste en una modificación de la heteroestructura anterior que se muestra en la Figura 8.13. Esta estructura proporciona confinamiento lateral para la luz, lo

que reduce la corriente umbral hasta $I_U \sim 60\text{mA}$. Usando esta estructura, es posible fabricar sobre el mismo sustrato semiconductor, muchos láseres en paralelo y así conseguir potencias de hasta 10 vatios en modo continuo.

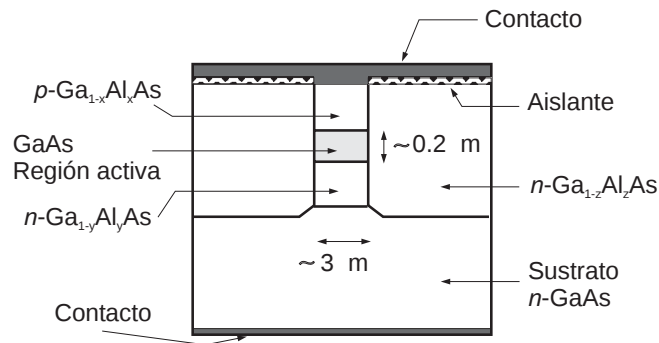


FIGURA 8.13: Heteroestructura típica de los láseres semiconductores comerciales actuales.

Pozos cuánticos

Un tipo de confinamiento distinto basado en fenómenos cuánticos se ha conseguido mediante el uso de capas de material muy finas ($\sim 10\text{ nm}$) que se comportan respecto a los electrones como un **pozo cuántico**. La idea básica del pozo cuántico se consigue al intercalar una capa muy fina con una banda prohibida de anchura pequeña entre capas gruesas con anchuras de banda prohibida mayores. Los electrones que pasan por esta configuración de bandas pueden ser *capturados* en el pozo cuántico. Estos electrones capturados tienen suficiente energía para permanecer en la Banda de Conducción del material que forma la fina capa de pequeña anchura de banda prohibida, pero no para entrar en la capa de mayor anchura de banda prohibida.

Si los pozos cuánticos se colocan en una unión p-n de un diodo láser, permiten concentrar en capas muy finas los electrones y huecos, consiguiendo una eficaz recombinación de éstos que disminuye considerablemente la intensidad umbral. Además, dado que las capas de confinamiento tienen diferentes índices de refracción, también posibilitan el confinamiento de luz.

Longitud de onda

En general, los medios activos de los diodos láser presentan altas ganancias, de forma que no se requieren muchas oscilaciones en la cavidad resonante para producir acción láser. Dado que típicamente la región que actúa de cavidad tiene una longitud de $\sim 300 - 500\mu\text{m}$, los modos resonantes de esta cavidad están más separados que en otros láseres (cuyas cavidades resonantes son al menos de $\sim 10-30\text{ cm}$) y

como resultado, la mayoría de los diodos láser normalmente oscilan a una sola frecuencia *al mismo tiempo*. No obstante, debido a que la anchura de la curva de ganancia es grande, el diodo láser puede emitir distintas longitudes de onda (*saltando* de una λ resonante a otra) dando lugar a un funcionamiento bastante inestable. Este fenómeno puede solucionarse mediante el uso de dispositivos añadidos de sintonización y estabilización.

Divergencia del haz

Otra característica importante del diodo láser es la inusual divergencia del haz emitido. La geometría de la pequeña cavidad junto con la minúscula área de emisión (generalmente una pequeña rendija del orden de los μm^2) se combinan para producir un haz no circular que se dispersa muy rápidamente, típicamente del orden de 40 grados. Se encuentra por tanto que los rayos de un diodo láser divergen más rápidamente que los de una buena lámpara de flash. Afortunadamente, el uso de una óptica adecuada permite una buena focalización del haz y así, por ejemplo, los diodos láser se usan como fuente de luz de los *punteros láser*.

Modulación

Según puede observarse en la Figura 8.10, la salida óptica del diodo láser depende linealmente de la corriente que circula a través de éste. Esta simple dependencia lineal hace que la modulación del haz pueda conseguirse modulando directamente la corriente de alimentación, constituyendo este hecho una de las principales ventajas de los láseres de inyección. Dado que la respuesta de la salida óptica a las variaciones de la corriente de alimentación es muy rápida, se consiguen anchuras de banda típicas en la modulación del orden de los Gigahertzios.

8.5. Aplicaciones del Láser

Las posibles aplicaciones del láser pueden dividirse en varias categorías. Una de las más usuales consiste en distinguir la acción de los láseres de baja potencia de aquellos de alta potencia. En la presente sección se expondrán únicamente algunas de las aplicaciones de los láseres de baja potencia. Generalmente, se denomina baja potencia a cantidades menores que un watio, bajo la suposición de que el haz láser no afecta destructivamente a los objetos que ilumina. Es interesante señalar que en muchas de las posibles aplicaciones de láser, éste

se emplea básicamente como una *bombilla de muy alta eficacia*. Algunas de las características diferenciadoras de los láseres de baja potencia respecto a otras posibles fuentes de luz son:

- Láseres producen luz *bien controlada* que puede ser focalizada con precisión sobre una minúscula región de un objeto. Este hecho tiene multitud de aplicaciones, por ejemplo en *contadores, lectores de códigos de barras, lectores de CD, discos magneto-ópticos, etc.*
- Al focalizarse la luz sobre una pequeña región, se pueden conseguir altas densidades de potencia, que pueden usarse para un calentamiento selectivo de pequeñas regiones.
- Debido a la alta directividad de los rayos láser, éstos pueden definir líneas rectas. Esta propiedad se usa para el diseño de *posicionadores y punteros*.
- La luz láser posee normalmente un estrecho rango de longitudes de onda, siendo este hecho altamente aprovechado en *espectroscopía*.
- La alta coherencia que presentan muchos láseres es aprovechada para la *holografía* y fundamentalmente para *metrología*.
- Los láseres pueden generar pulsos extremadamente cortos, siendo esto muy útil para la *transmisión de datos*.
- Láseres de He-Ne y de inyección producen potencias muy constantes en modo continuo durante miles de horas de uso.
- Los diodos láser son muy compactos y baratos.
- Dado que los diodos láser pueden ser modulados directamente a altas velocidades mediante cambios en la corriente de alimentación, son muy usados en la *transmisión de datos*.

8.5.1. Aplicaciones del Láser de Inyección

Debido a las peculiaridades del láser de inyección (tamaño reducido, bajo coste, modulación directa...), éste se ha convertido con diferencia en el láser más popular, siendo actualmente usado en millones de lectores de discos ópticos (en equipos de música, computadores...) y en la mayoría de los sistemas de alimentación de fibras ópticas para transmisión de datos.

Discos ópticos; Lectura de datos para computadores

El funcionamiento básico de lectura de un CD-ROM se muestra en la Figura 8.14, donde puede verse como la luz de un diodo láser es

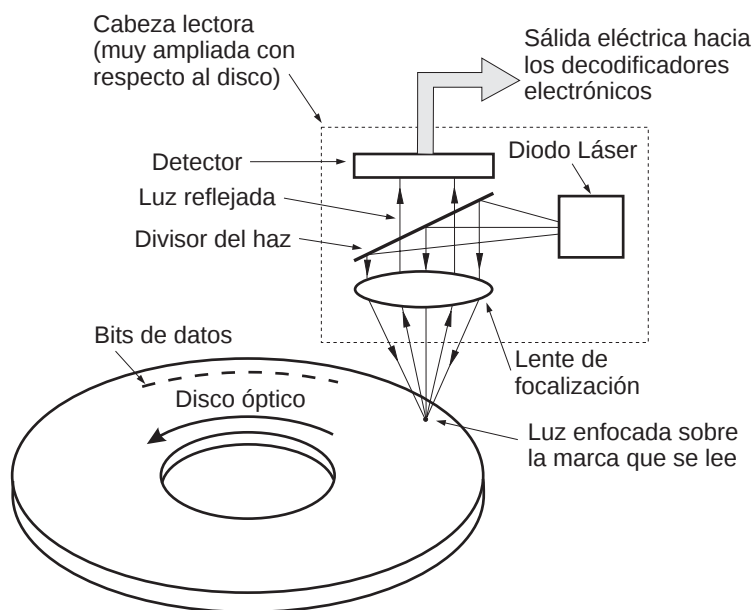


FIGURA 8.14: Sistema de lectura de un CD-ROM.

focalizada sobre una diminuta región de un disco que gira rápidamente. La superficie del disco está cubierta con minúsculas partículas, con diferente reflectividad que el fondo del disco, de acuerdo a un cierto patrón de bits de datos. La luz láser reflejada por el disco es enfocada sobre un detector que genera una señal eléctrica en forma de una serie de pulsos correspondientes al patrón de datos registrado en el disco.

Debido a que el haz del diodo láser puede ser enfocado sobre una región que cubre aproximadamente un diámetro de una longitud de onda, esto significa que el uso de diodos láser de $\lambda = 780 \text{ nm}$ permite que cada una de las marcas del disco debe cubrir aproximadamente $1 \mu\text{m}^2$. De este modo, un CD-ROM de 12 cm de diámetro permite almacenar $\sim 600 \text{ MBytes}$, incrementándose considerablemente la densidad de almacenamiento de datos con respecto a los anteriores discos magnéticos. La focalización a distinta profundidad permite igualmente el uso de discos ópticos *multicapas*, dando así lugar a un incremento adicional muy importante de la cantidad de información que se puede almacenar.

Dado que los diodos láser son muy pequeños y pueden ser montados en la cabeza lectora, esto permite un acceso a la información muy rápido (si se dispone de un software de control adecuado) con independencia de donde esté localizada en el disco. Por otra parte, los diodos láser requieren poca potencia para su funcionamiento, siendo además esta potencia del mismo orden que la que se usa en los dispositivos electrónicos, aumentando así la compatibilidad entre la parte electrónica y la óptica.

Discos magneto-ópticos; Almacenamiento y Lectura de datos para computadores

El mayor inconveniente de los CD-ROM proviene de su carácter de *memoria de sólo lectura*. Las intensas investigaciones realizadas para conseguir discos de alta densidad de almacenamiento de datos y con posibilidad de ser regrabados por el usuario han resultado en el desarrollo del *disco magneto-óptico*. La diferencia fundamental de este disco con respecto al CD-ROM consiste en una cubierta de un material parcialmente transparente con propiedades ferrimagnéticas. Este material manifiesta una magnetización neta a temperatura ambiente que puede ser modificada por encima de cierta temperatura (temperatura de Neel) cuando está en la fase paramagnética. Tal como se muestra en la Figura 8.15, el aumento de temperatura local de una pe-

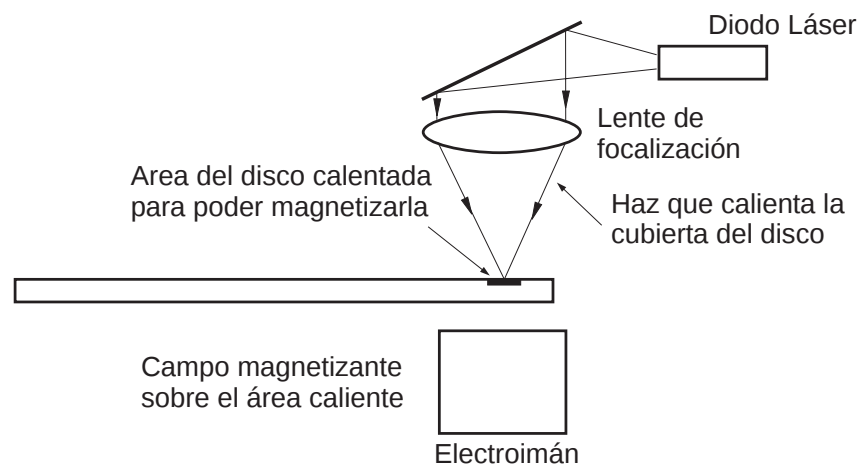


FIGURA 8.15: Esquema de grabación de un disco magneto-óptico.

queña región del disco se consigue mediante el haz focalizado de un diodo láser. Una vez que se ha alcanzado la temperatura adecuada, la pequeña región es magnetizada en la dirección impuesta por un electroimán. Nótese que la grabación de datos es puramente magnética, pero debido a que la magnetización se realiza en dirección normal al disco y que se pueden magnetizar regiones muy localizadas, se consiguen unas densidades de almacenamiento de datos muy altas.

La lectura del disco magneto-óptico se realiza mediante un procedimiento similar al del CD-ROM, aunque en este caso se usa el hecho de que la refracción de un haz polarizado en un material magnetizado produce un haz reflejado cuya polarización sufre una variación que depende de la dirección de magnetización del material refractante. Detectando, por tanto, los estados de polarización del haz reflejado por la cubierta magnetizada del disco y registrando estos estados en pulsos eléctricos se consigue recobrar el patrón de datos grabado previamente de forma magnética.

Comunicaciones por fibra óptica

Actualmente las fibras ópticas se han convertido en el soporte físico dominante en las telecomunicaciones de larga distancia *punto a punto*. Los LEDs pueden excitar los sistemas de fibra óptica cuando la transmisión se realiza a corta distancia (por ejemplo: en un mismo edificio) pero se necesitan fuentes más monocromáticas para las comunicaciones de larga distancia, usándose para este cometido como fuentes estándar los diodos láser, debido a

- Diodo láser emite en un área de unos pocos μm^2 ; lo cual es ideal para acoplarse bien con el diminuto núcleo de la fibra óptica ($\sim 10\mu\text{m}$)
- Es muy compacto y opera con los mismos niveles de tensión e intensidad que los dispositivos electrónicos convencionales.

El esquema básico de transmisión se muestra en la Figura 8.16. La

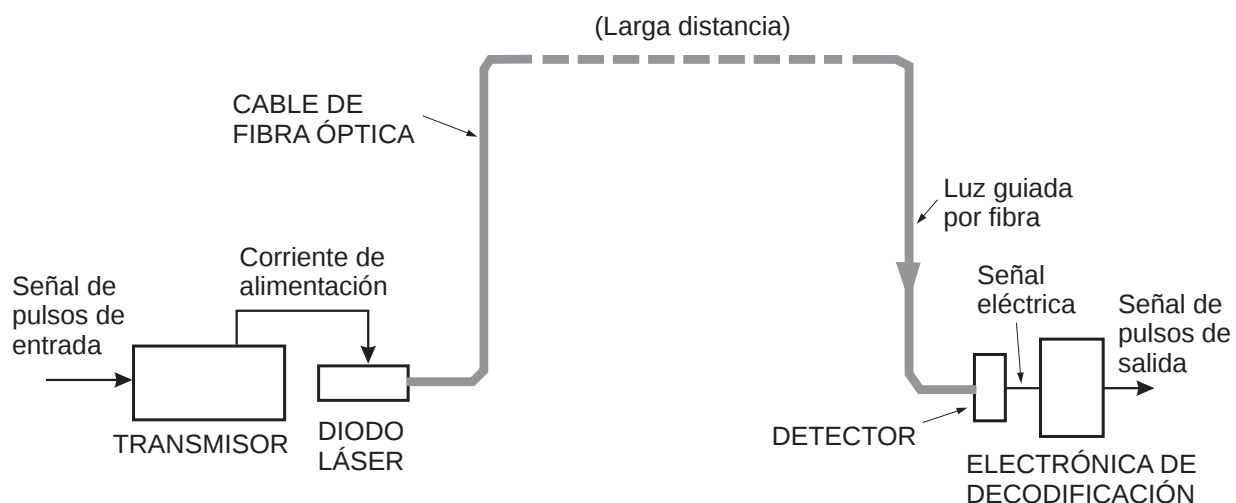


FIGURA 8.16: Sistema de fibra óptica para larga distancia

señal que alcanza el transmisor genera una corriente que pasa a través de un láser semiconductor. La señal es una serie de pulsos eléctricos que genera una correspondiente serie de pulsos luminosos en el diodo láser. El láser emite los pulsos directamente al núcleo de la fibra óptica, siendo transmitida por ésta (hasta $\sim 10^4$ km) a un receptor lejano. Allí, un detector de luz convierte los pulsos luminosos en pulsos eléctricos.

8.6. Problemas propuestos

8.1: Una unión p-n abrupta presenta $N_A = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ en el lado p y $N_d = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ en el lado n . A 300 K, **(a)** calcule los niveles de Fermi, dibuje el diagrama de bandas en equilibrio y halle V_0 a partir del anterior diagrama; **(b)** Compare el resultado anterior con el que proporciona la expresión (8.2); **(c)** Calcule la anchura de la región de carga espacial y el valor del campo eléctrico en esta región.

8.2: Compare los valores del potencial de contacto del problema anterior para el Si con los que se obtendrían en uniones hechas en Ge y GaAs con los mismos niveles de dopaje.

8.3: La corriente a través de una unión p-n a 300 K es $0.01 \mu\text{A}$ para una polarización inversa de 10 V. Calcule el valor de la corriente a través de la unión para polarizaciones directas de (a) 0.1 V, (b) 0.3 V, y (c) 0.5 V.

8.4: Teniendo en cuenta que la corriente de saturación inversa debe ser lo más pequeña posible en una unión p-n ideal ¿qué material es más adecuado para la fabricación de uniones p-n?. $E_g(\text{Si}) = 1.1 \text{ eV}$.

8.5: La corriente de saturación inversa para una unión p-n es $I_0 = 5 \times 10^{-9} \text{ A}$. Para una polarización directa de 0.45 V, **(a)** calcule la corriente a través de la unión a $T = 27^\circ\text{C}$; **(b)** si el voltaje a través de la unión se supone constante e I_0 no cambia con la temperatura, ¿cuál es la corriente a través de la unión a $T = 47^\circ\text{C}$?

Sol. (a): 0.18 A, **(b)** 0.06 A.

8.6: Una unión p^+-n en Si está dopada con $N_d = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, siendo $D_p = 10 \text{ cm}^2/\text{s}$, $\tau_p = 0.1 \mu\text{s}$ y el área de la unión $S = 10^{-4} \text{ cm}^2$. Calcule la corriente de saturación inversa y la corriente directa cuando $V = 0.6 \text{ V}$.

Apéndice A

Constantes fundamentales

Constante de Planck:	$h = \begin{array}{l} 6,626 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s} \\ 4,136 \times 10^{-15} \text{ eV}\cdot\text{s} \end{array}$
----------------------	--

Velocidad de la luz:	$c = 2,998 \times 10^8 \text{ m/s}$
----------------------	-------------------------------------

Masa del electrón:	$m_e = 9,109 \times 10^{-31} \text{ kg}$
--------------------	--

Carga del electrón (sin signo):	$e = 1,602 \times 10^{-19} \text{ C}$
---------------------------------	---------------------------------------

Masa del protón:	$m_p = 1,673 \times 10^{-27} \text{ kg}$
------------------	--

Número de Avogadro:	$\mathcal{N}_A = 6,022 \times 10^{23} \text{ partículas/mol}$
---------------------	---

Constante de Boltzmann:	$k_B = \begin{array}{l} 1,381 \times 10^{-23} \text{ J/K} \\ 8,620 \times 10^{-5} \text{ eV/K} \end{array}$
-------------------------	---

Apéndice B

Energía y longitud de onda de una partícula relativista

La expresión de la energía, E , de una partícula libre proporcionada por la Relatividad Especial es

$$E^2 = m_0^2 c^4 + p^2 c^2, \quad (\text{B.1})$$

donde m_0 es la *masa en reposo* de la partícula material, c la velocidad de la luz y p el módulo de su momento lineal.

La energía de la partícula libre puede también expresarse como la suma de su energía cinética, E_c , más su energía en reposo, $m_0 c^2$, esto es,

$$E = E_c + m_0 c^2. \quad (\text{B.2})$$

Operando en (B.1) y teniendo en cuenta (B.2), tenemos que

$$\begin{aligned} p^2 c^2 &= E^2 - m_0^2 c^4 = (E - m_0 c^2)(E + m_0 c^2) = E_c(E_c + 2m_0 c^2) \\ &= 2m_0 c^2 E_c \left(1 + \frac{E_c}{2m_0 c^2}\right), \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

de donde obtenemos la siguiente expresión para el momento lineal:

$$p = \sqrt{2m_0 E_c} \left(1 + \frac{E_c}{2m_0 c^2}\right)^{1/2}. \quad (\text{B.4})$$

Teniendo ahora en cuenta la expresión (1.28) que relaciona el módulo del momento lineal con la longitud de onda, λ , asociada a la onda piloto de la partícula, encontramos que esta λ puede expresarse como

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_0 E_c} \left(1 + \frac{E_c}{2m_0 c^2}\right)^{1/2}}. \quad (\text{B.5})$$

En el caso de que la energía cinética de la partícula sea mucho menor que su energía en reposo,

$$E_c \ll m_0 c^2;$$

es decir, si la velocidad de la partícula, v , es mucho menor que la velocidad de la luz ($v^2 \ll c^2$), entonces la masa de la partícula puede igualarse a su masa en reposo,

$$m \approx m_0 ,$$

y las expresiones (B.4) y (B.5) pueden simplificarse en

$$p = \sqrt{2mE_c} = mv . \quad (\text{B.6})$$

y

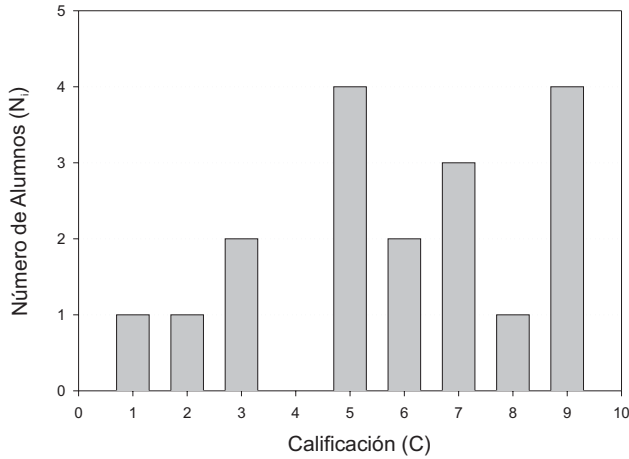
$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE_c}} . \quad (\text{B.7})$$

Apéndice C

Promedios estadísticos

C.1. Sistemas Discretos

Sea un sistema discreto compuesto de $N_{\text{Total}} = 18$ alumnos. Supóngase que la distribución de notas ha sido la siguiente: un alumno ha obtenido un uno, $N_1 = 1$, un alumno ha obtenido un dos, $N_2 = 1$, $N_3 = 2$, $N_4 = 0$, $N_5 = 4$, $N_6 = 2$, $N_7 = 3$, $N_8 = 1$, $N_9 = 4$, $N_{10} = 0$. Cada N_i puede reinterpretarse como una medida de la probabilidad de que un alumno de este colectivo obtenga una determinada nota. Una representación gráfica de esta distribución se representa a continuación



Dado que $\sum_{i=1}^{10} N_i = N_{\text{Total}}$, la probabilidad de obtener una determinada nota vendrá dada por

$$n_i = \frac{N_i}{N_{\text{Total}}}, \quad (\text{C.1})$$

obteniéndose obviamente que $\sum_{i=1}^{10} n_i = 1$. La función distribución del sistema puede identificarse con n_i .

El valor de la calificación promedio, $\langle C \rangle$, de las notas obtenidas por el colectivo de alumnos se obtiene mediante

$$\langle C \rangle = \frac{\sum_{i=1}^{10} N_i C_i}{\sum_{i=1}^{10} N_i} = \sum_{i=1}^{10} n_i C_i . \quad (\text{C.2})$$

Análogamente, el valor promedio de cualquier magnitud ($F(C_i)$) que dependa de las calificaciones se obtendrá como

$$\langle F \rangle = \sum_{i=1}^{10} n_i F(C_i) . \quad (\text{C.3})$$

C.2. Sistemas Continuos

Las discusiones anteriores para casos discretos pueden fácilmente extenderse a sistemas continuos, para ello debe notarse que el papel jugado por la suma será ahora asumido por el proceso de integración,

$$\sum \Longleftrightarrow \int dx .$$

Por tanto, partiendo de una determinada función de distribución, $\eta(x)$, debe cumplirse que

- La probabilidad de que el sistema tome alguno de los valores x debe ser igual a la unidad:

$$\int \eta(x) dx = 1 . \quad (\text{C.4})$$

- El valor promedio de la variable x se calculará como

$$\langle x \rangle = \int x \eta(x) dx . \quad (\text{C.5})$$

- El valor promedio de una función de x , por ejemplo $f(x)$, puede obtenerse a partir de la función distribución como

$$\langle f(x) \rangle = \int f(x) \eta(x) dx . \quad (\text{C.6})$$

Apéndice D

Propiedades de algunos materiales semiconductores

Para el silicio (Si), germanio (Ge) y arsenuro de galio (GaAs) a $T = 300\text{ K}$, encontramos que

	E_g (eV)	m_e^* / m_e	m_h^* / m_e	μ_n ($\text{cm}^2 / \text{V} \cdot \text{s}$)	μ_p ($\text{cm}^2 / \text{V} \cdot \text{s}$)
Si	1.11	1.1	0.56	1350	480
Ge	0.67	0.55	0.37	3900	1900
GaAs	1.43	0.067	0.48	8500	400

- Densidad efectiva de estados para Si en BC
 $N_C = 4,39 \times 10^{24} \text{ m}^{-3}$
- Densidad efectiva de estados para Si en BV
 $N_V = 5,95 \times 10^{24} \text{ m}^{-3}$

Apéndice E

Invarianza del nivel de Fermi en equilibrio

La invarianza del nivel de Fermi en equilibrio térmico podría explicarse a partir de la igualación del trabajo de extracción de dos metales cuando éstos se unen perfectamente. No obstante, desde un punto de vista más riguroso, podemos recurrir al hecho de que, en *equilibrio térmico*, NO existe una corriente neta de carga en un material formado por la unión perfecta de dos materiales 1 y 2 con densidades de estado y probabilidades de ocupación $g_1(E)$, $f_1(E)$ y $g_2(E)$, $f_2(E)$ respectivamente. Para cualquier nivel de energía, la velocidad de transferencia de electrones de $1 \rightarrow 2$ será proporcional al número de estados ocupados en 1 por el número de estados vacíos en 2, es decir,

$$1 \rightarrow 2 \propto g_1 f_1 \cdot g_2 (1 - f_2) \quad (\text{E.1})$$

y, análogamente,

$$2 \rightarrow 1 \propto g_2 f_2 \cdot g_1 (1 - f_1) . \quad (\text{E.2})$$

En equilibrio y para que no haya corriente neta debe cumplirse que el número de electrones por unidad de tiempo que pasan de $1 \rightarrow 2$ sea el mismo que aquel que pase de $2 \rightarrow 1$, lo que implica que

$$g_1 f_1 \cdot g_2 (1 - f_2) = g_2 f_2 \cdot g_1 (1 - f_1) . \quad (\text{E.3})$$

Reagrupando términos llegamos a que

$$g_1 f_1 g_2 - g_1 f_1 g_2 f_2 = g_2 f_2 g_1 - g_2 f_2 g_1 f_1 , \quad (\text{E.4})$$

y dado que $g_1 \neq g_2$ (puesto que estas magnitudes dependen directamente de las características de los metales), la igualdad anterior exige que

$$f_1(E) = f_2(E) , \quad (\text{E.5})$$

y por tanto

$$\left[1 + \exp\left(\frac{E - E_{F1}}{k_B T}\right) \right]^{-1} = \left[1 + \exp\left(\frac{E - E_{F2}}{k_B T}\right) \right]^{-1} . \quad (\text{E.6})$$

Para que se satisfaga la igualdad anterior para cualquier valor de energía, E , debe ocurrir que

$$E_{F1} = E_{F2} ,$$

lo que implica que no existe ninguna discontinuidad en el nivel de Fermi en equilibrio. De forma más general, esta propiedad puede establecerse como la inexistencia de gradiente en el nivel de Fermi en equilibrio,

$$\frac{dE_F}{dx} = 0 . \quad (E.7)$$