

TEMA 5: INTROD. AL ESTADO SÓLIDO

5.3 Electrones libres en metales: modelo de Drude

- Se pretende explicar las propiedades de los metales a partir de diferentes modelos (5.3: Drude y 5.4: bandas)
- Propiedades de los metales:
 - Todos, excepto el mercurio, son sólidos a temperatura ambiente.
 - Casi los 2/3 de los elementos del Sistema Periódico son metales

TEMA 5: INTROD. AL ESTADO SÓLIDO

5.3 Electrones libres en metales: modelo de Drude

Estructuras de los metales
<http://www.ehu.es/zorrilla/juanma/T7Metales.pdf>

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
	Li	Be													
	Na	Mg											Al		
	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga		
	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	
	Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	

ccp: cúbico compacto (caras)
bcc: cúbico centrado en cuerpo
scp: ortorrómbico
hcp: hexagonal compacto
tetr: tetragonal
r: romboédrico

Juan M. Gutiérrez-Zorrilla, Química Inorgánica, 2005

TEMA 5: INTROD. AL ESTADO SÓLIDO

5.3 Electrones libres en metales: modelo de Drude

- Son buenos conductores del calor y de la electricidad.

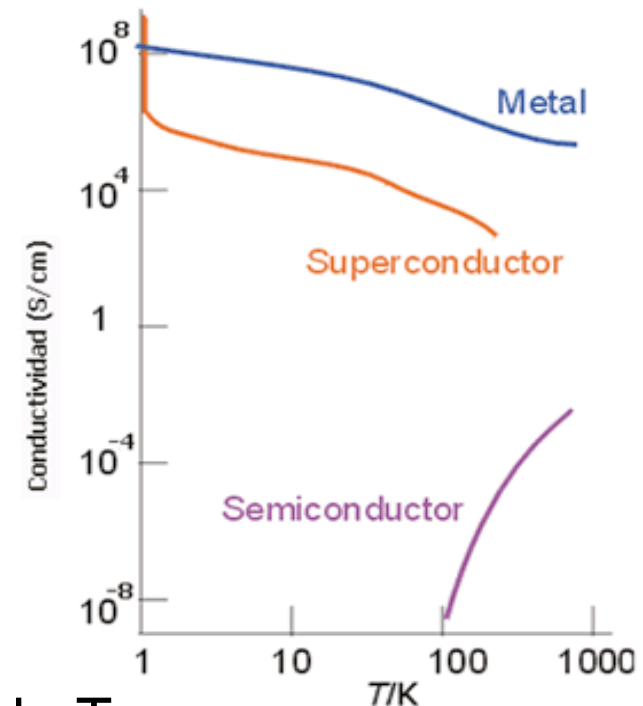
- Su conductividad eléctrica:

- Es grande: $\sigma \sim 10^7 \Omega^{-1}m^{-1}$
- Decrece con la temperatura

$$\sigma = \frac{\sigma_0}{1 + \alpha t_C}$$

- Portadores de carga: son electrones

- Concentración de e^- : no depende de T
- $n \sim 10^{28} m^{-3}$



<http://www.ing.udep.edu.pe/>

Universidad de Piura
Facultad de Ingeniería
QUÍMICA GENERAL 1

TEMA 5: INTROD. AL ESTADO SÓLIDO

5.3 Electrones libres en metales: modelo de Drude

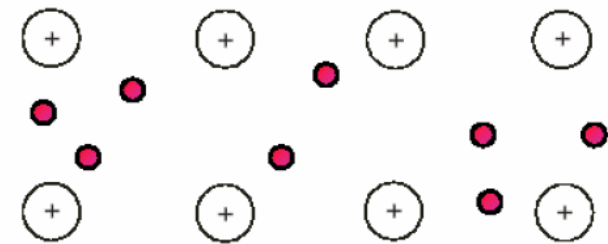
■ Modelo de Drude

- Movimiento de los electrones relativamente libre, semejante al de las moléculas de un gas perfecto
- Choques entre los electrones y con los nudos de la red cristalina

□ Velocidad en ausencia de un E:

■ Movimiento aleatorio

$$\rightarrow v_{promedio} = 0$$



- Resto de magnitudes: teoría cinética de gases (estadística de Maxwell-Boltzmann)

TEMA 5: INTROD. AL ESTADO SÓLIDO

5.3 Electrones libres en metales: modelo de Drude

■ Modelo de Drude (cont)

□ Velocidad en presencia de un E:

- El campo eléctrico arrastra los electrones en sentido opuesto

- Les comunica una aceleración:

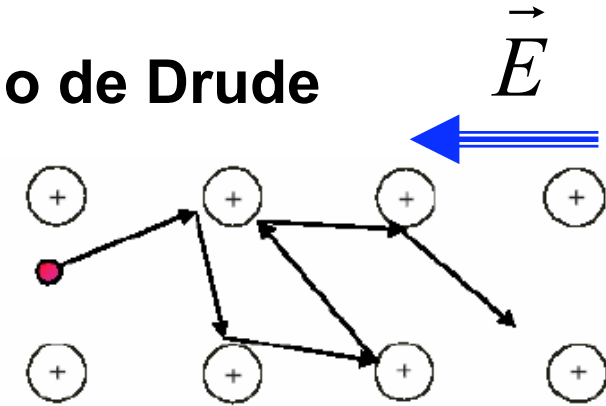
$$a = \frac{F}{m_q} = \frac{q E}{m_q}$$

($q = -e$)

- Choques: velocidad constante

- #### □ La movilidad tiene signo:

$$\mu = \frac{q \tau}{m_e} = -\frac{e \tau}{m_e}$$



Movimiento de arrastre resultante

velocidad
arrastre

tiempo de
relajación

$$v = a t = \frac{q E}{m_q} \tau = \left(\frac{q \tau}{m_q} \right) E$$

movilidad μ

$$v = \mu E$$

TEMA 5: INTROD. AL ESTADO SÓLIDO

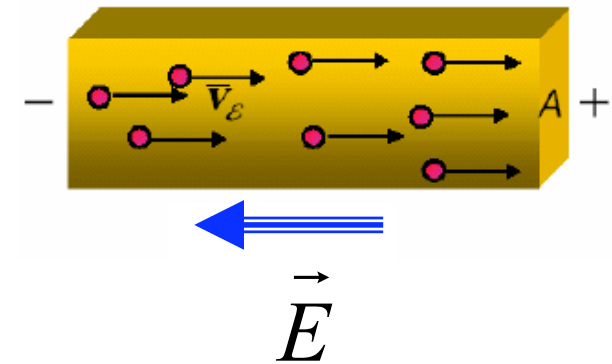
5.3 Electrones libres en metales: modelo de Drude

- Modelo de Drude (cont)

- Ley de Ohm:

- La densidad de corriente:

$$J_a = \frac{I_a}{A} = \frac{1}{A} \frac{\Delta Q}{\Delta t} =$$



TEMA 2: CIRCUITOS DE CC

2.1 Corriente eléctrica (cont)

■ En un cable conductor:

- n : número de partículas libres portadoras de carga / Vol
- q : carga de cada partícula
- v_d : velocidad

■ En Δt

- pasa un volumen $A \cdot v_d \cdot \Delta t$
- pasan $N = n \cdot A \cdot v_d \cdot \Delta t$ partículas
- pasa una carga: $\Delta Q = q \cdot n \cdot A \cdot v_d \cdot \Delta t$

■ La corriente eléctrica: $$I = \frac{\Delta Q}{\Delta t} = nqAv_d$$

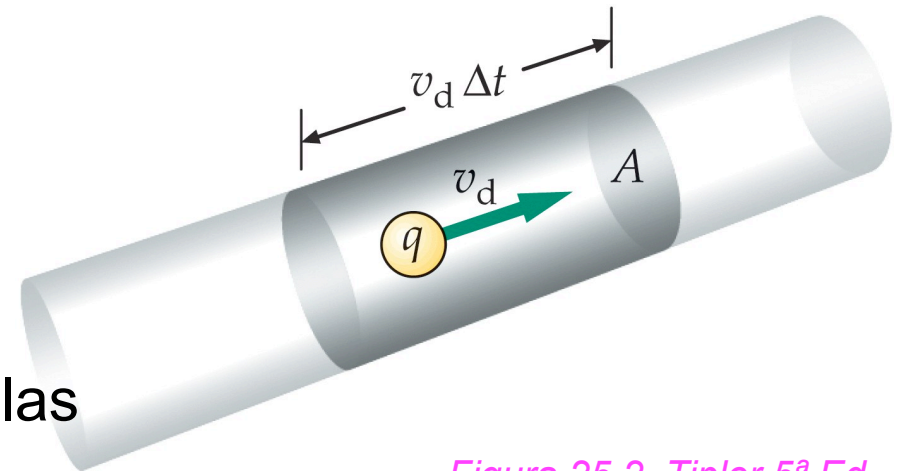


Figura 25.2, Tipler 5ª Ed

TEMA 5: INTROD. AL ESTADO SÓLIDO

5.3 Electrones libres en metales: modelo de Drude

■ Modelo de Drude (cont)

□ Ley de Ohm:

■ La densidad de corriente:

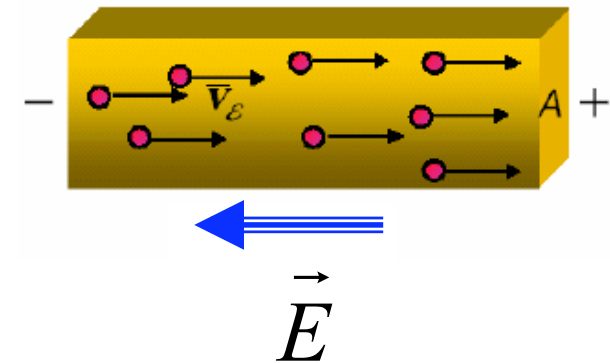
$$J_a = \frac{I_a}{A} = \frac{1}{A} \frac{\Delta Q}{\Delta t} = nq v_a$$

($q = -e$)

$$= n(-e) v_a = n(-e) \mu E$$

■ Como:

$$J_a = \sigma E$$



$$\sigma = n(-e)\mu = \frac{ne^2\tau}{m_e}$$

siempre +

TEMA 5: INTROD. AL ESTADO SÓLIDO

5.3 Electrones libres en metales: modelo de Drude

■ Modelo de Drude: limitaciones

□ Aciertos:


- Independencia de la conductividad con el campo eléctrico:
$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m_e}$$

□ Fallos:

- Dependencia incorrecta de la conductividad con la temperatura: τ aumenta con T
- No predice la diferente conductividad de los materiales
- CONSECUENCIA: hay que cambiar de modelo
 - Origen del fallo: los electrones no son partículas clásicas
 - SOLUCION: debemos aplicar la teoría cuántica

TEMA 5: INTROD. AL ESTADO SÓLIDO

5.4 Electrones en metales: teoría de bandas

- Modelo de bandas:
 - Teoría clásica: un electrón puede adquirir cualquier energía
 - Teoría cuántica: los electrones sólo pueden ocupar ciertos niveles de energía
 - Átomos aislados: niveles energéticos separados
 - Átomos en un sólido: los niveles energéticos cambian
- 

¿Cómo?

TEMA 5: INTROD. AL ESTADO SÓLIDO

5.4 Electrones en metales: teoría de bandas

■ Modelo de bandas:

□ Átomo aislado → red cristalina:

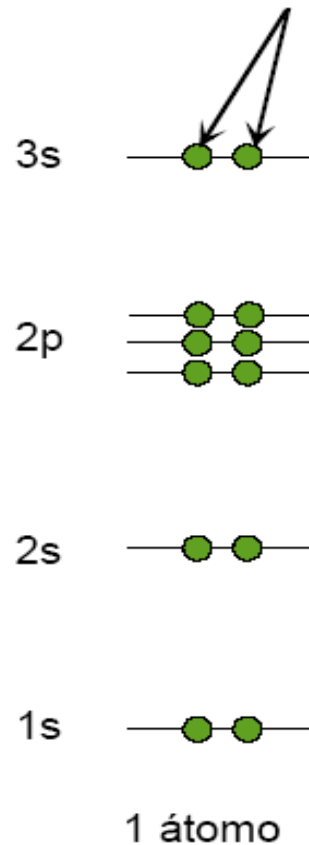
<http://www.ing.udep.edu.pe/>

Universidad de Piura

Facultad de Ingeniería

QUÍMICA GENERAL 1

■ Teoría Pauli: máximo 2 electrones por orbital



1 átomo

TEMA 5: INTROD. AL ESTADO SÓLIDO

5.4 Electrones en metales: teoría de bandas

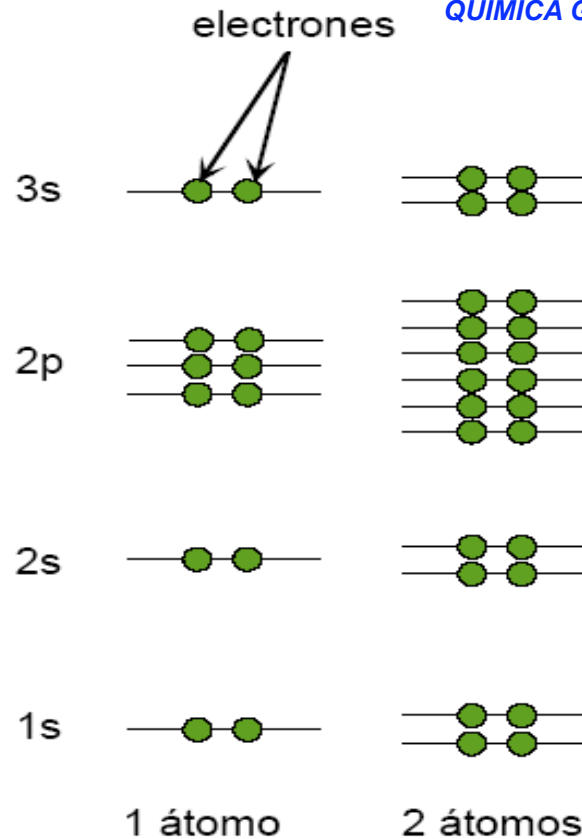
- Modelo de bandas:

- Efecto de la red cristalina:

<http://www.ing.udep.edu.pe/>

Universidad de Piura
Facultad de Ingeniería
QUÍMICA GENERAL 1

- Teoría Pauli:
máximo
2 electrones
por orbital



1 átomo

2 átomos

TEMA 5: INTROD. AL ESTADO SÓLIDO

5.4 Electrones en metales: teoría de bandas

- Modelo de bandas:

- Efecto de la red cristalina:

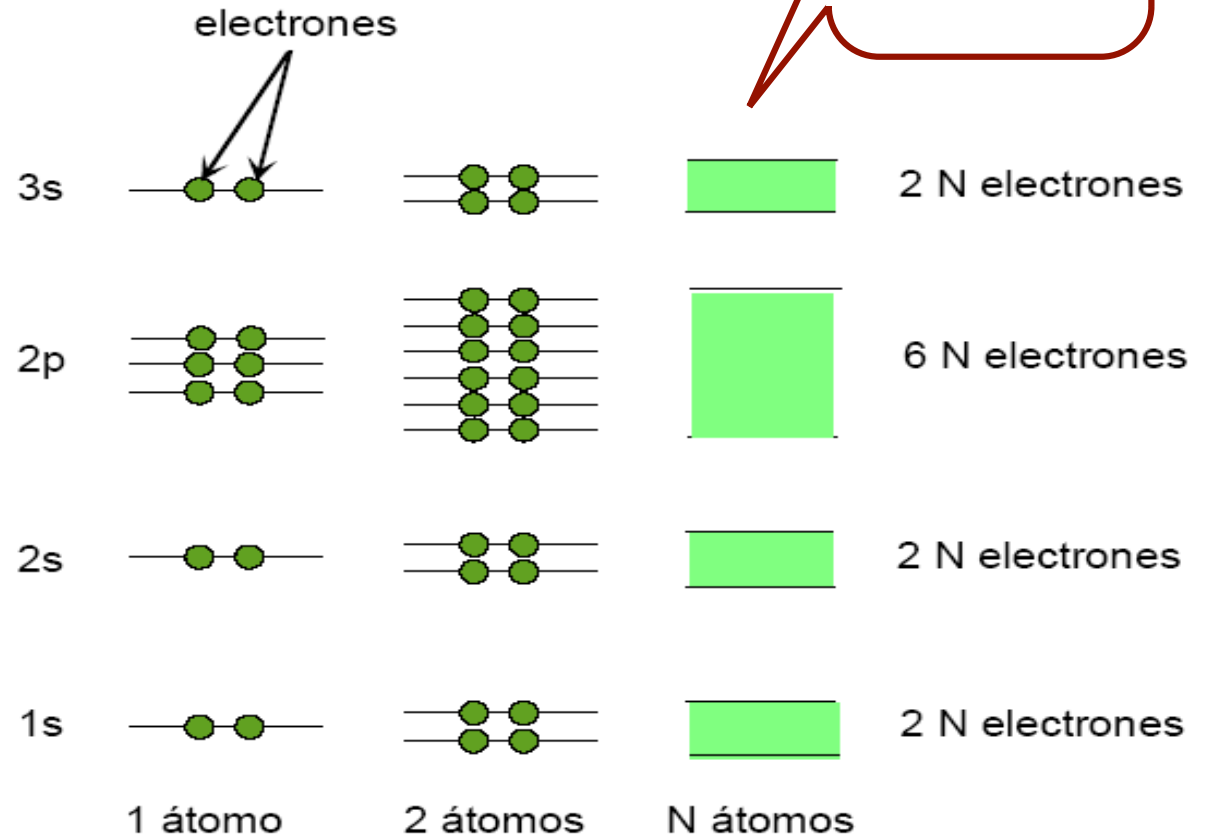
- Teoría Pauli:
máximo
2 electrones
por orbital

- Los electrones de un sólido **SOLO** pueden ocupar ciertas **BANDAS** de energía.

<http://www.ing.udep.edu.pe/>

Universidad de Piura
Facultad de Ingeniería
QUÍMICA GENERAL 1

N átomos=
N niveles
= **BANDA**



1 átomo

2 átomos

N átomos

TEMA 5: INTROD. AL ESTADO SÓLIDO

5.4 Electrones en metales: teoría de bandas

- Modelo de bandas:

- Teoría de la conducción eléctrica, desde el punto de vista de la teoría de bandas:

- Para conducción eléctrica: e^- en movimiento ...
 - ... debe adquirir energía cinética ...
 - ... debe aumentar su energía total ...
 - ... deben haber niveles libres en banda con energía superior



Para la **CONDUCCIÓN ELÉCTRICA**, debe haber **NIVELES DE ENERGÍA LIBRES** en bandas superiores

TEMA 5: INTROD. AL ESTADO SÓLIDO

5.4 Electrones en metales: teoría de bandas

- Modelo de bandas:

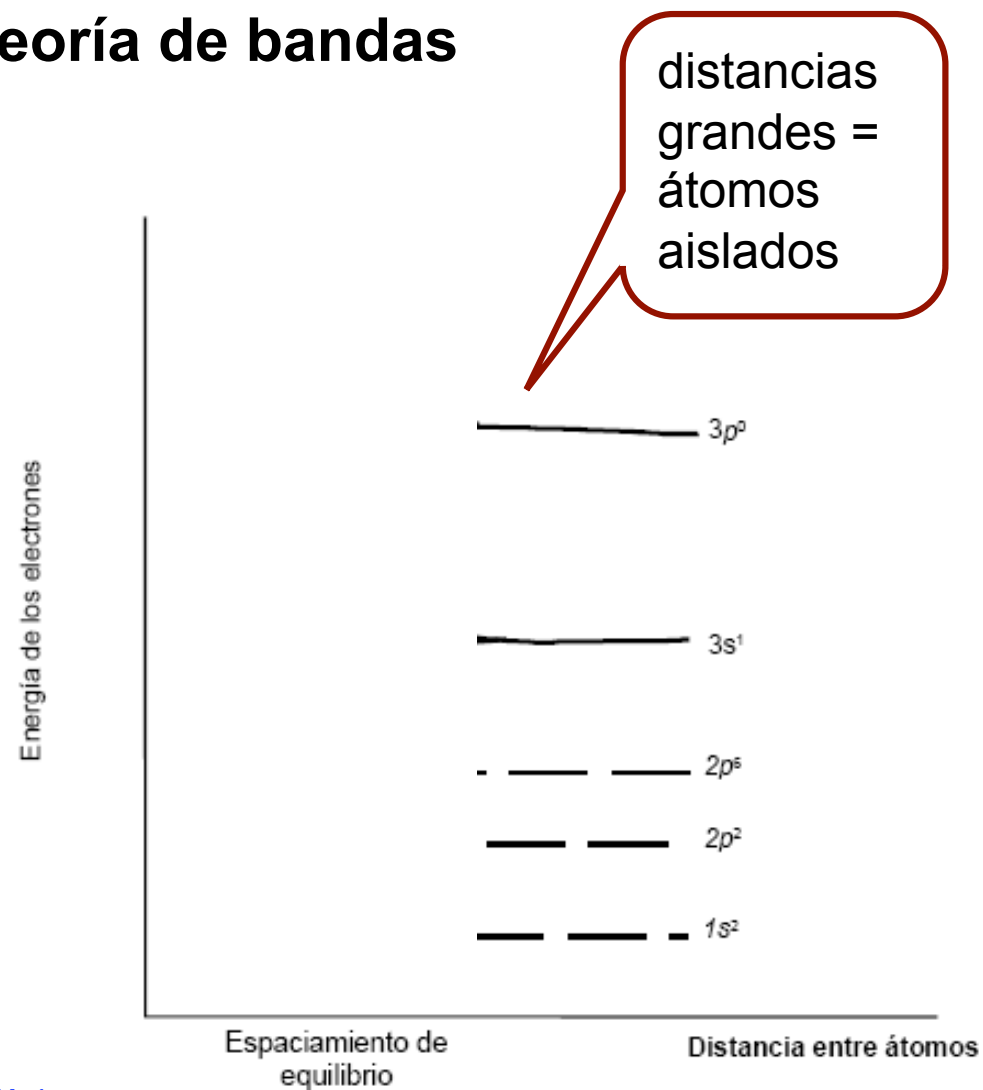
- Para la **CONDUCCIÓN ELÉCTRICA**, debe haber **NIVELES DE ENERGÍA LIBRES** en bandas superiores
- Se denomina **BANDA DE VALENCIA** a la última banda de energía ocupada o semiocupada
- Se denomina **BANDA DE CONDUCCIÓN** a la primera banda de energía vacía

TEMA 5: INTROD. AL ESTADO SÓLIDO

5.4 Electrones en metales: teoría de bandas

- Modelo de bandas:

- Metales tipo Na:



<http://www.ing.udep.edu.pe/>

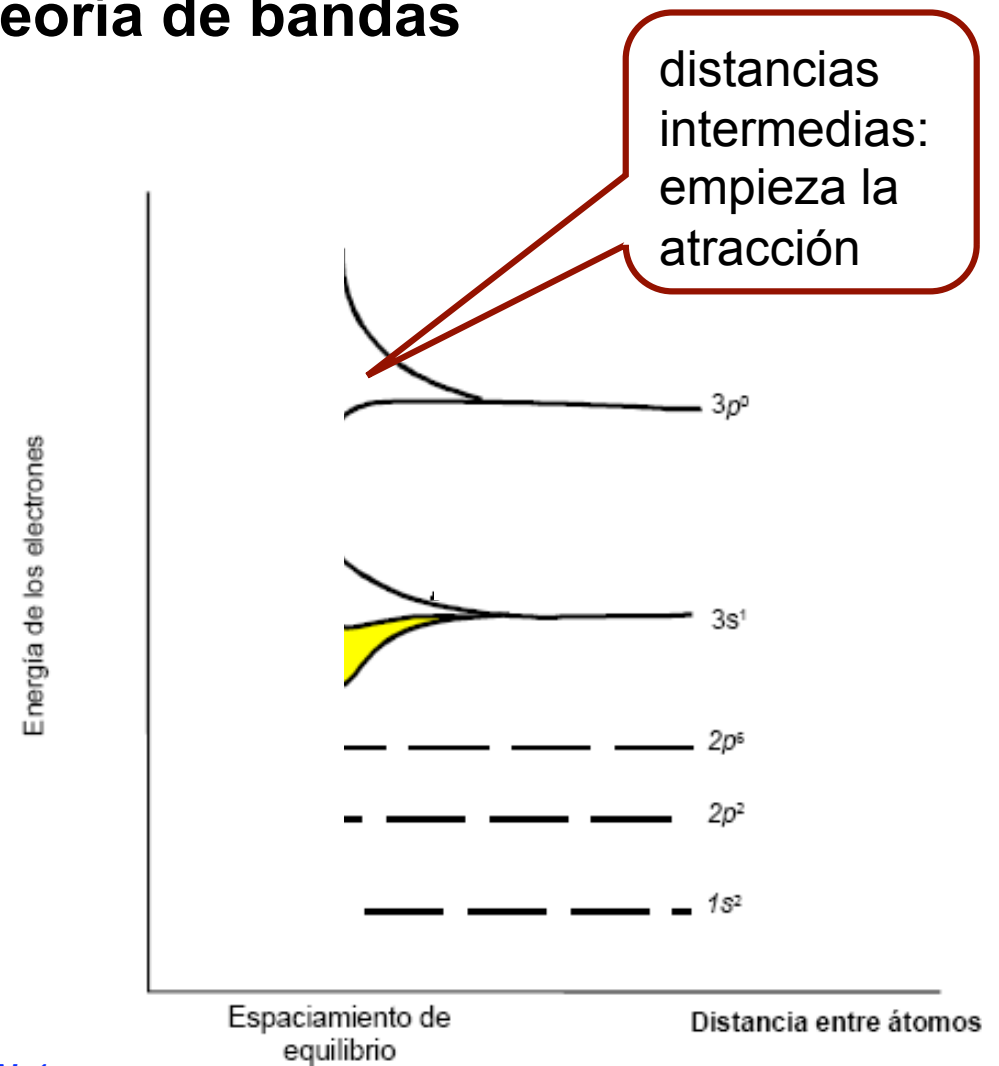
Universidad de Piura, Facultad de Ingeniería, QUÍMICA GENERAL 1

TEMA 5: INTROD. AL ESTADO SÓLIDO

5.4 Electrones en metales: teoría de bandas

- Modelo de bandas:

- Metales tipo Na:



<http://www.ing.udep.edu.pe/>

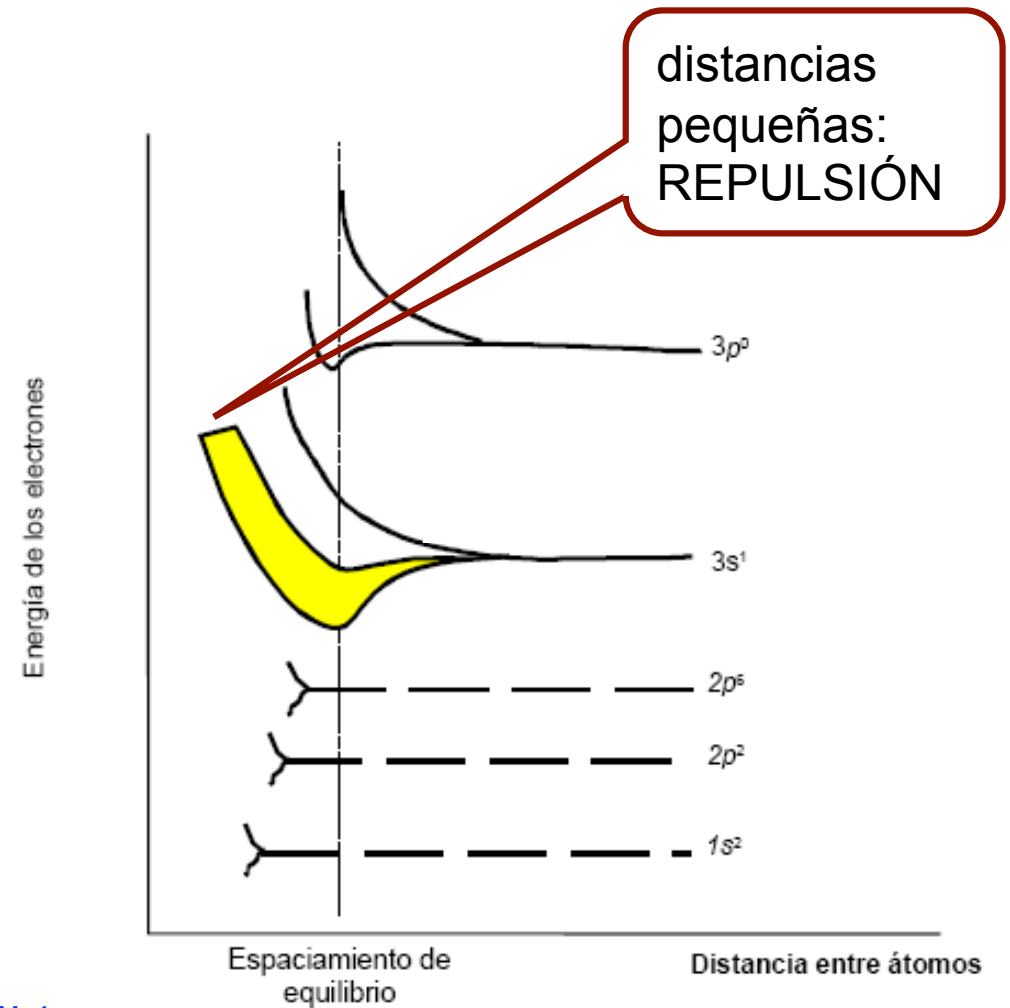
Universidad de Piura, Facultad de Ingeniería, QUÍMICA GENERAL 1

TEMA 5: INTROD. AL ESTADO SÓLIDO

5.4 Electrones en metales: teoría de bandas

- Modelo de bandas:

- Metales tipo Na:



<http://www.ing.udep.edu.pe/>

Universidad de Piura, Facultad de Ingeniería, QUÍMICA GENERAL 1

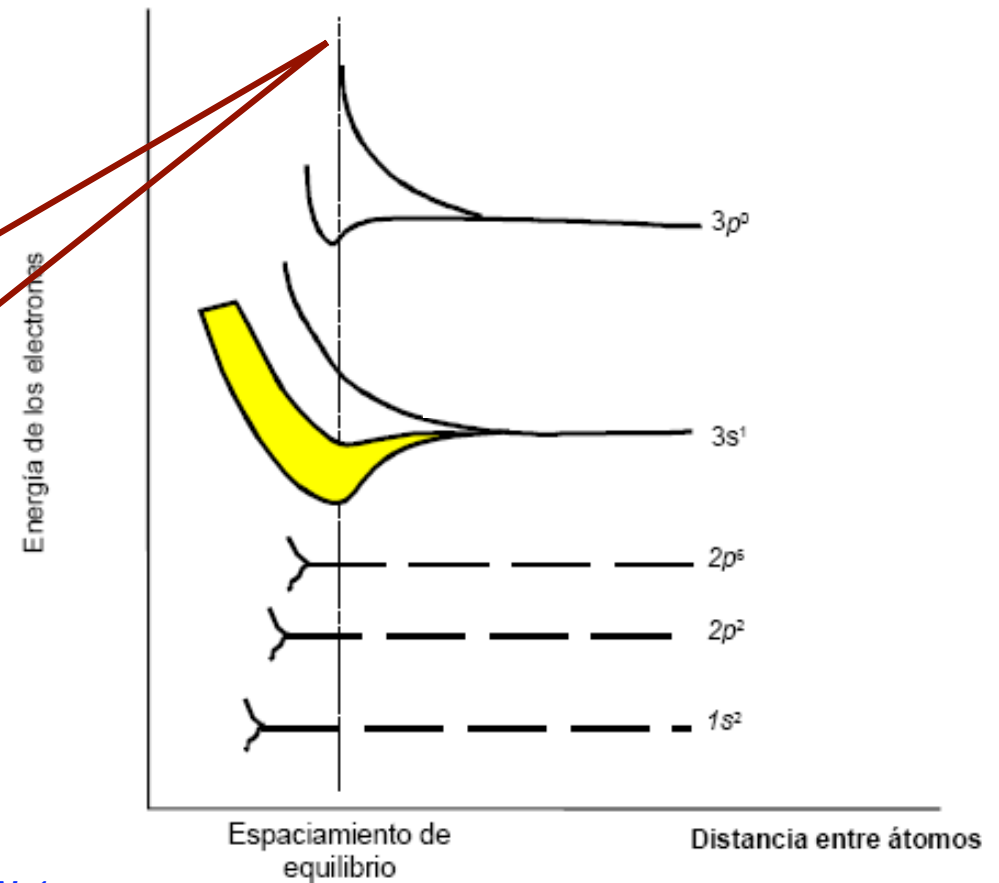
TEMA 5: INTROD. AL ESTADO SÓLIDO

5.4 Electrones en metales: teoría de bandas

■ Modelo de bandas:

□ Metales tipo Na:

distancias de
EQUILIBRIO =
distancia entre
átomos en el
SÓLIDO



<http://www.ing.udep.edu.pe/>

Universidad de Piura, Facultad de Ingeniería, QUÍMICA GENERAL 1

TEMA 5: INTROD. AL ESTADO SÓLIDO

5.4 Electrones en metales: teoría de bandas

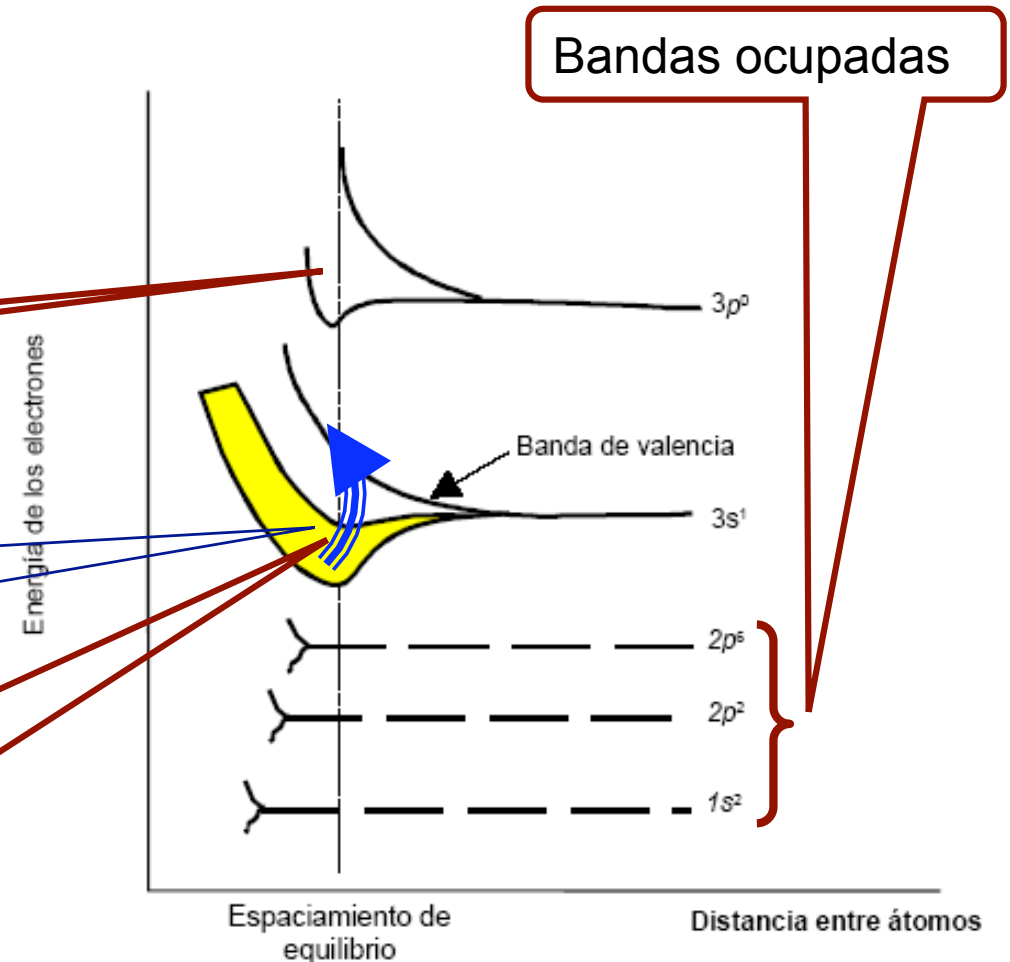
- Modelo de bandas:

- Metales tipo Na:

Banda de **conducción vacía**

Los electrones disponen de niveles para ocupar

Banda de **valencia semiocupada**



<http://www.ing.udep.edu.pe/>

Universidad de Piura, Facultad de Ingeniería, QUÍMICA GENERAL 1

TEMA 5: INTROD. AL ESTADO SÓLIDO

5.4 Electrones en metales: teoría de bandas

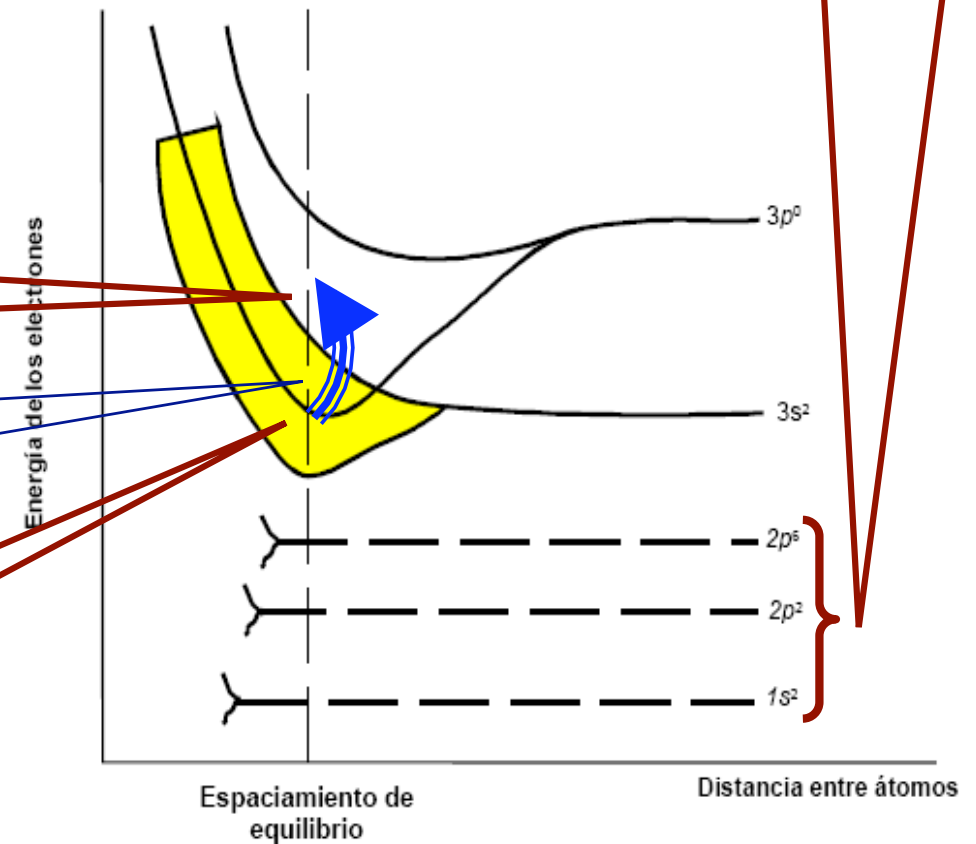
■ Modelo de bandas:

□ Metales tipo Mg:

Banda de **conducción vacía**
Y SUPERPUESTA

Los electrones
disponen de niveles
para ocupar

Banda de **valencia llena**



<http://www.ing.udep.edu.pe/>

Universidad de Piura, Facultad de Ingeniería, QUÍMICA GENERAL 1

TEMA 5: INTROD. AL ESTADO SÓLIDO

5.4 Electrones en metales: teoría de bandas

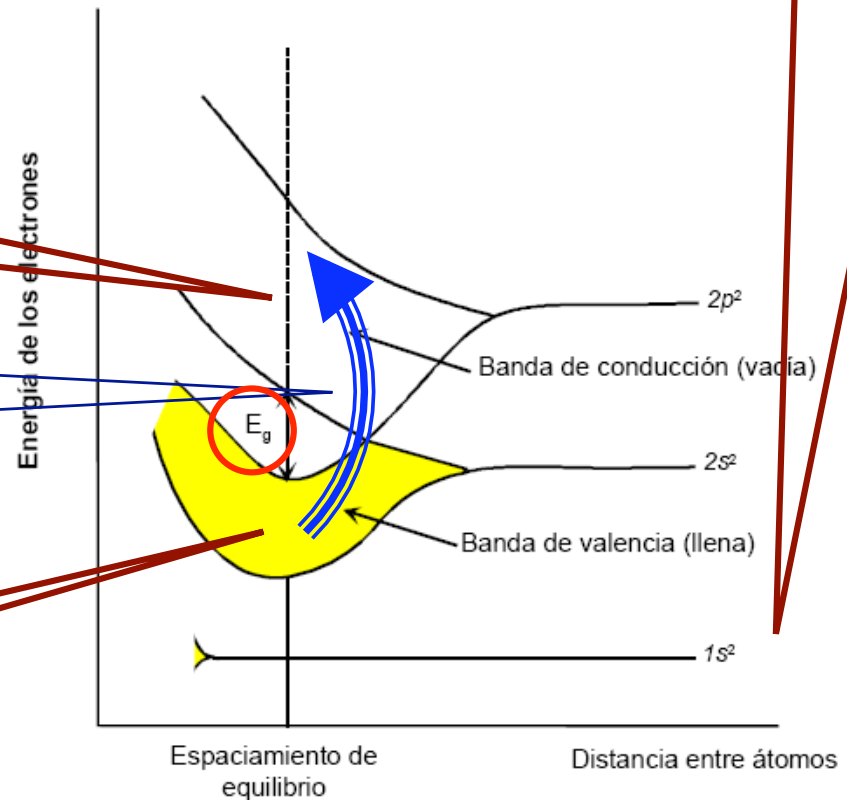
■ Modelo de bandas:

□ Semiconductores:

Banda de **conducción vacía**
ALEJADA E_g

Los electrones
disponen de niveles
para ocupar **si $E > E_g$**

Banda de **valencia llena**



Bandas ocupadas

<http://www.ing.udep.edu.pe/>

Universidad de Piura, Facultad de Ingeniería, QUÍMICA GENERAL 1

TEMA 5: INTROD. AL ESTADO SÓLIDO

5.4 Electrones en metales: teoría de bandas

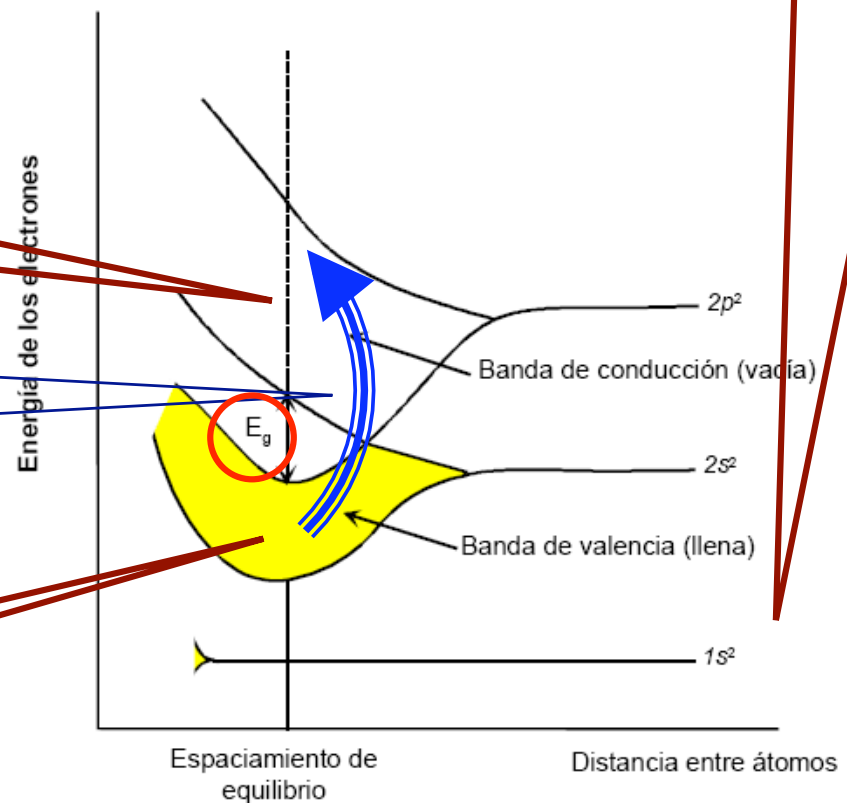
■ Modelo de bandas:

□ Aislantes

Banda de **conducción vacía**
MUY ALEJADA E_g

El gap de energía E_g
es muy grande
 $E_g \gg 1 \text{ eV}$

Banda de **valencia llena**



<http://www.ing.udep.edu.pe/>

Universidad de Piura, Facultad de Ingeniería, QUÍMICA GENERAL 1

Material	Estructura electrónica	Conductividad ($\Omega^{-1} \text{ m}^{-1}$)
Metales alcalinos		
Na	$1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^1$	2.13×10^7
K, $3s^2, 3p^6, 4s^1$	1.64×10^7
Metales alcalinotérreos		
Mg	$1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2$	2.25×10^7
Ca, $3s^2, 3p^6, 4s^2$	3.16×10^7
Metales del grupo IIIA		
Al	$1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^1$	3.77×10^7
Ga, $3s^2, 3p^6, 3d^{10}, 4s^2, 4p^1$	0.66×10^7
Metales de transición		
Fe	$1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6, 3d^{10}, 4s^2$	1.00×10^7
Ni	$1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6, 3d^{10}, 4s^2$	1.46×10^7
Metales del grupo IB		
Cu	$1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6, 3d^{10}, 4s^1$	5.98×10^7
Ag, $4d^{10}, 5s^1$	6.80×10^7
Au, $5d^{10}, 6s^1$	4.26×10^7
Metales del grupo IV		
Sn, $5s^2, 5p^2$	0.90×10^7
Si	$1s^2, 2s^2, 2p^2, 3s^2, 3p^2$	5×10^{-4}
Ge, $4s^2, 4p^2$	2.00
C (diamante)	$1s^2, 2s^2, 2p^2$	$> \times 10^{-16}$

conductores

conductor

semiconductor

aislante