

## VII ELECTRONES LIBRES EN SOLIDOS

Modelo clásico, modelo cuántico

## VIII. ELECTRONES EN UN POTENCIAL PERIÓDICO.

Teoría de bandas en sólidos. Semiconductores

## IX. JUNTURA P-N. DIODO. (VA A CHARLAS)

## VII ELECTRONES LIBRES EN SOLIDOS

Resumen de lo visto: Soluciones particulares a la ecuación de Schrödinger.

### 1) Electrones libres

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi = 0. \quad \psi(x) = Ae^{i\alpha x}, \quad \alpha = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}. \quad (\text{ec.1})$$

En nuestro caso especial solo tomamos los electrones que vienen desde  $-\infty$ . La solución  $\psi(x,t)$  es:

$$Ae^{i\alpha x} \cdot e^{i\omega t}$$

Dado que no existen condiciones de borde para el electrón libre, todos los valores de energía son “permitidos”, o sea obtenemos como solución un continuo de energía. (Fig.1), con E:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \alpha^2.$$

$$\alpha = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = \frac{p}{\hbar} = \frac{2\pi}{\lambda} = k,$$

A partir de  $E = \frac{p^2}{2m}$  y  $p = \hbar k$

Como el momento y la velocidad son vectores, k es un vector, Cuyas componentes son  $k_x$ ,  $k_y$ , and  $k_z$ . Su módulo se relaciona con la longitud de onda por:  $|k| = \frac{2\pi}{\lambda}$ .

### 2) Electrón en un pozo de potencial (Electrón ligado)

Donde se eligió en forma arbitraria  $V=0$ , dentro del pozo

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi = 0. \quad \alpha = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}.$$

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \alpha^2 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3 \dots$$

(ec.3)

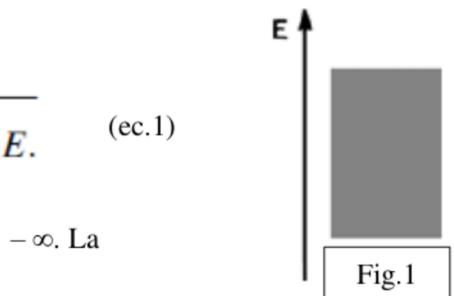


Fig.1

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2. \quad (\text{ec.2})$$

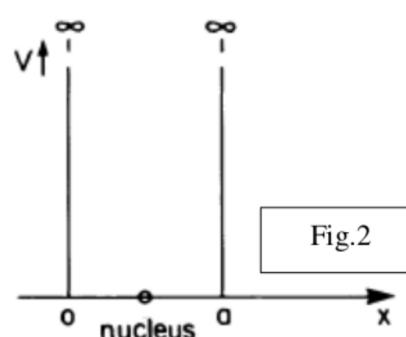


Fig.2

Notar que  $n=0$  no es solución porque daría  $\psi=0$  o sea sin función de onda. Existe una notable diferencia con respecto al caso 1). Al haber condiciones de contorno, solo hay solución cuando  $n$  es un número entero. La energía solo puede tomar los valores determinados por (ec.3). Todas las demás energías no están permitidas. Los valores permitidos se denominan "niveles de energía",

representados en la Fig.3 para el caso unidimensional, donde  $C$  representa la energía más baja  $E_1$  y su valor sale de (ec.3) para  $n=1$ .

Debido al hecho de que un electrón de un átomo aislado puede asumir solo ciertos niveles de energía, se deduce que las energías que se excitan o absorben también poseen solo valores discretos.

La energía más baja que puede asumir un electrón se llama "energía de punto cero" O sea, la energía más baja del electrón no es la del fondo del pozo potencial, sino un valor ligeramente más alto.

En la Fig.4 se grafica  $\psi$  y  $|\psi|^2$ .

De especial interés es el comportamiento de la función  $\psi\psi^*$ , la probabilidad de encontrar el electrón en un determinado lugar

dentro del pozo (Fig. 4 (b)). En el caso clásico, el electrón viajaría de un lado a otro entre las paredes. Por lo tanto, su función de probabilidad se distribuiría por igual a lo largo de la longitud del pozo. En mecánica cuántica, la desviación del caso clásico es más pronunciada para  $n=1$ . En este caso,  $\psi\psi^*$  es mayor en el centro del pozo y desaparece en los límites. Para  $n=2$ , la probabilidad de encontrar un electrón en el centro del pozo (y en los límites) es cero, mientras que el  $\psi\psi^*$  más grande se encuentra en  $1/4$  a y  $3/4$  a. Para valores de  $n$  más altos (para energías más altas) los valores para  $\psi\psi^*$  se aproximan al valor clásico.

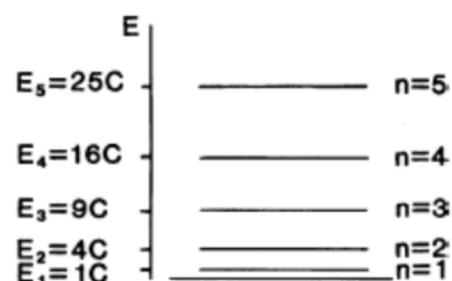
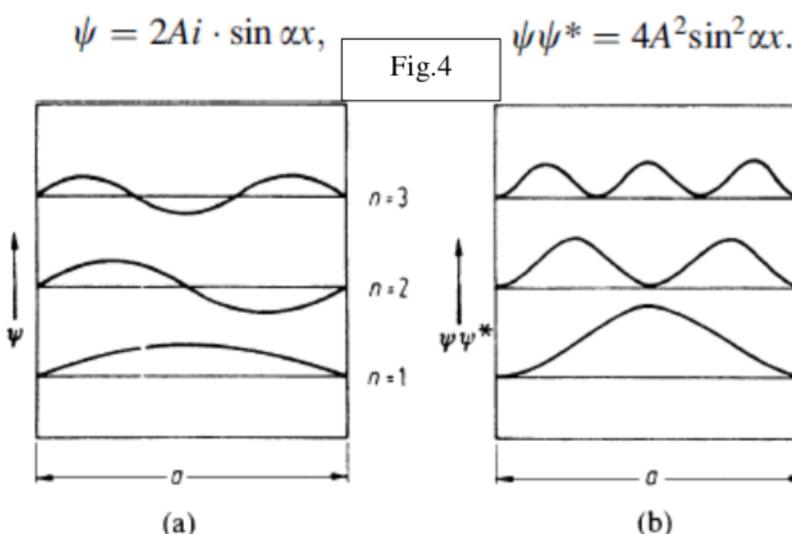


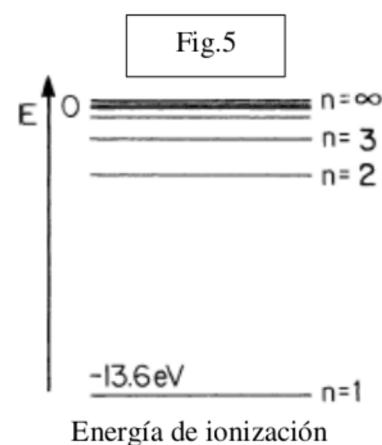
Fig.3



Los resultados que se obtienen al considerar un electrón en un pozo cuadrado son similares a los que se calculan para un átomo de hidrógeno. En ambos casos se considera al electrón con carga  $-e$  unido a su núcleo. El potencial,  $V$ , que ve el electrón se elige como el potencial de Coulombiano  $V = -e^2 / (4\pi\epsilon_0 r)$ . Como  $V$  es una función del radio,  $r$ , la ecuación de Schrödinger se expresa más convenientemente en coordenadas polares. El tratamiento conduce, de manera similar a la anterior, a niveles de energía discretos:

$$E = -\frac{me^4}{2(4\pi\epsilon_0\hbar)^2} \frac{1}{n^2} = -13.6 \cdot \frac{1}{n^2} (\text{eV}). \quad (\text{ec.4})$$

La principal diferencia en comparación con el modelo de pozo cuadrado es que la energía ahora es proporcional a  $1/n^2$  (y no a  $n^2$  como en (ec.3)). Esto da como resultado una "acumulación" de niveles de energía a energías más altas. La energía en el nivel más bajo se llama energía de ionización, la que debe suministrarse para eliminar un electrón de su núcleo. En la Fig.5 se muestran los niveles de energía para el átomo de hidrógeno, ver la (ec.4). El origen de la escala de energía se la eligió arbitrariamente en  $n = 1$  y las energías de



ionización se cuentan negativamente. Hasta ahora, hemos determinado que el electrón está confinado a un pozo unidimensional.

Un cálculo similar para un pozo potencial tridimensional ("electrón en una caja") que se desarrolla en la sección 23.3a, nos lleva a una ecuación que es análoga a la (ec.3):

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2). \quad (\text{ec.5})$$

La energía más baja permitida en un pozo de potencial tridimensional es la ocupada por un electrón con  $n_x=n_y=n_z=1$ . Para la siguiente energía más alta hay tres posibilidades diferentes para combinar los valores  $n$ ;  $(n_x, n_y, n_z) = (1, 1, 2), (1, 2, 1)$  o  $(2, 1, 1)$ . Los estados que tienen la misma energía pero diferentes números cuánticos se denominan estados "degenerados". Para el caso descripto tenemos un estado con degeneración tres.  
Ver soluciones en sección 23.3a

### 3) Potencial finito, Barrera (Efecto túnel)

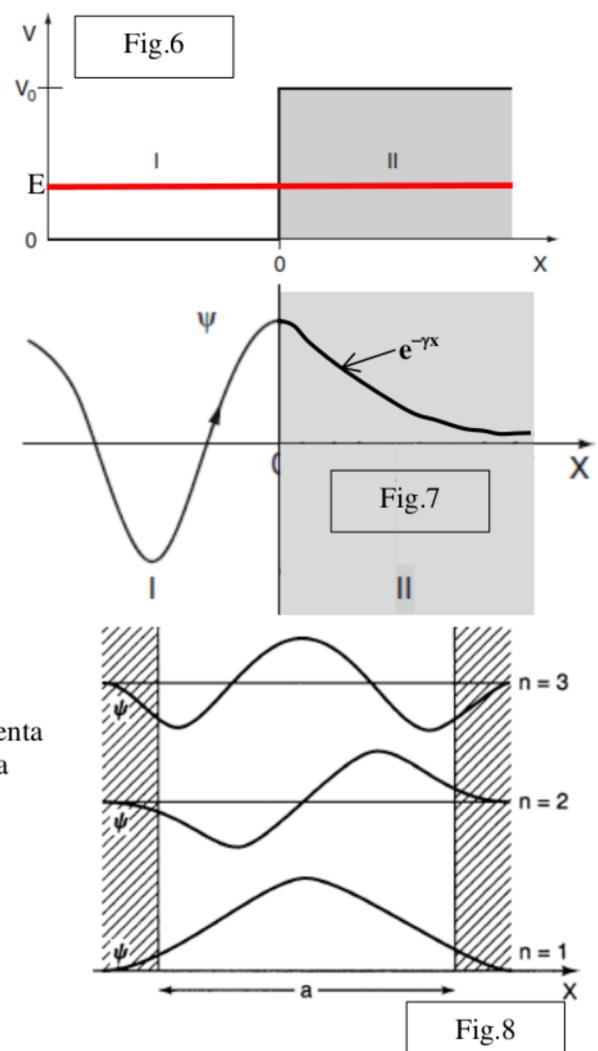
Ya resolvimos el caso de un electrón libre, que se propaga en la dirección x positiva, encuentra una barrera potencial cuya energía potencial  $V_0$  (altura de la barrera) es finita y mayor que la energía total E del electrón. (Fig. 6). Para esta situación obtuvimos por solución para la región II (ec.6)

$$\psi_{\text{II}} = D e^{-\gamma x} \quad (\text{ec.6})$$

Este comportamiento queda ilustrado en la parte sombreada de la Fig.7, donde se observa la penetración de la función de onda en la zona sombreada.

Si la barrera potencial es moderadamente alta y relativamente estrecha, la onda de electrones puede continuar en el lado opuesto de la barrera (efecto túnel). Este es un efecto mecánico cuántico. En física clásica, se describiría que el electrón (partícula) se refleja completamente en la barrera, en  $x = 0$ , si su energía cinética es menor que  $V_0$ .

La Fig.8 ilustra la modificación de la Fig.4(a) cuando se tiene en cuenta el efecto de penetración en la barrera, donde puede observarse que la función de onda  $\psi$  penetra la zona prohibida.



### 4) Electrón en un potencial periódico de un cristal (el estado sólido)

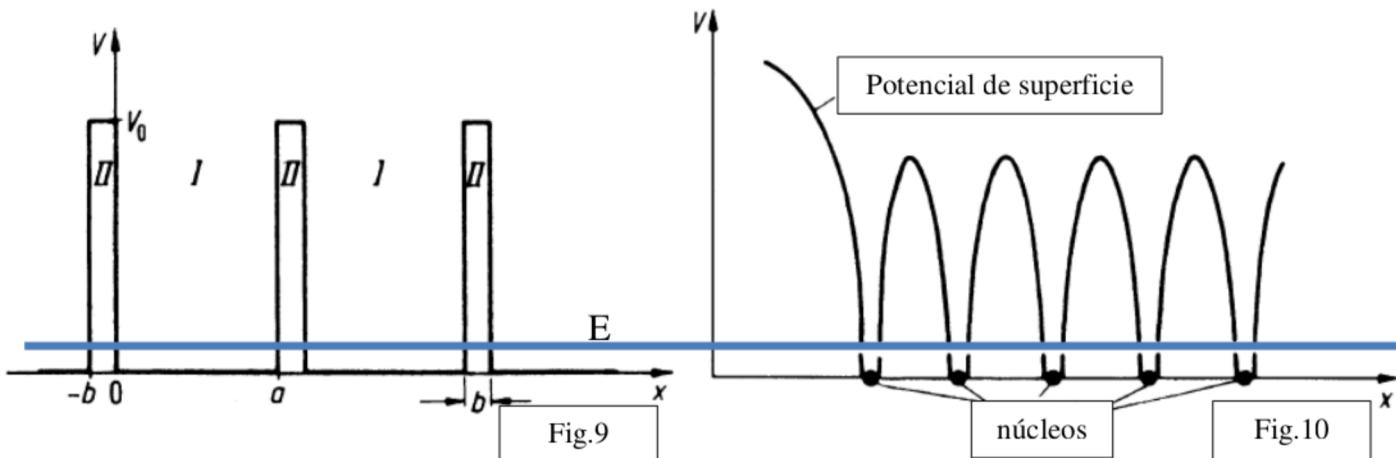
Ya vimos algunos casos especiales, el electrón completamente libre y el electrón que está confinado a un pozo de potencial. El objetivo es estudiar el comportamiento de un electrón en un cristal. Veremos que los casos analizados previamente pueden derivarse de este caso general.

La primera tarea es encontrar una distribución de energía potencial adecuada para un sólido.

Por difracción de rayos X, entre otros, se sabe que los átomos en un cristal están dispuestos periódicamente. Para el tratamiento de este problema, se propone una repetición periódica del pozo potencial de la Fig.2, o sea, una disposición periódica de pozos y barreras de potenciales. Es una propuesta cercana a la realidad y más adecuada para un cálculo. En la Fig.9 se muestra un esquema de una distribución periódica unidimensional (Modelo de Kronig-Penney).

Región I: pozos potenciales de longitud  $a$ . Estos pozos están separados por barreras potenciales de altura  $V_0$  y ancho  $b$  (Región II).  $V_0$  es mayor que la energía  $E$  del electrón.

Este modelo es una simplificación de la distribución potencial real en un cristal. No tiene en cuenta que los electrones internos están más fuertemente unidos al núcleo, o sea que la función potencial de una carga puntual varía como  $1/r$ . Tampoco considera que los potenciales individuales de cada sitio de red se superponen. En la Fig.10 se muestra una distribución potencial que ilustra estas características. Sin embargo, este modelo es menos adecuado para un cálculo simple que el que se muestra en la Fig.9.

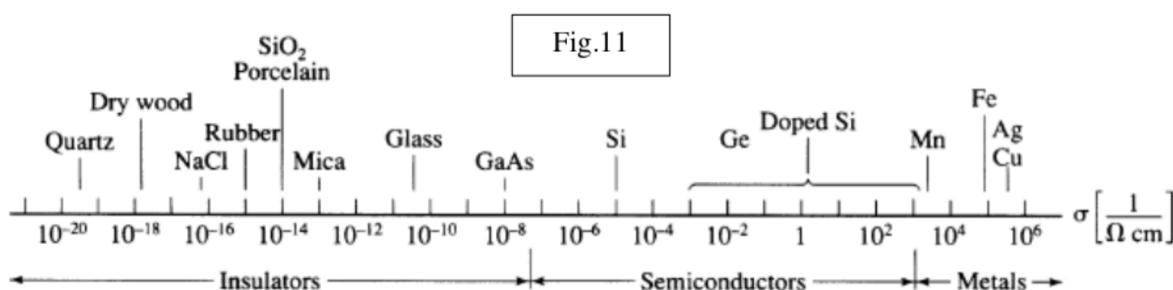


Más adelante (cap.24) encararemos la solución matemática a este problema y lo compararemos con la solución obtenida para el átomo aislado.

### Motivación

Explicar y predecir propiedades de materiales sólidos. Para ello nos valemos de la experiencia aprendida con átomos aislados. Vamos a tomar como primer reto explicar la conductividad eléctrica en materiales.

Al clasificar los materiales por su capacidad de conducir electricidad tendremos conductores, semiconductores y, aislantes. La conductividad eléctrica ( $\sigma$ ) a temperatura ambiente varía en 25 órdenes de magnitud. Si se incluyen los superconductores varían en 40 órdenes. Esta es la mayor variación conocida en una propiedad física y solo es comparable a la relación entre el diámetro del universo (aproximadamente  $10^{26}$  m) y el radio de un electrón ( $10^{-14}$  m).



En la Fig.11 se muestra  $\sigma$  para distintos materiales a  $T_{amb}$ . La de los semiconductores varía apreciablemente con la temperatura y la pureza. La unidad empleada es  $1/(\Omega\text{cm})$ . Es habitual usar cm en vez de m. Los superconductores poseen conductividades a 0K, muchos órdenes superiores a los del Cu, no se incluyen en la Fig.

### Conducción eléctrica en metales. Cap23 (García y Damask)

En los metales los electrones externos de valencia juegan un rol importante en la conducción.

En la sección 23. 1 se repasan los resultados experimentales para la conducción eléctrica en metales:

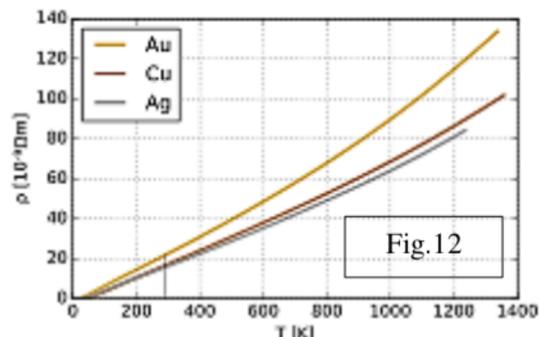
$$1) j = \sigma E \quad (\text{ec.7})$$

La densidad de corriente depende linealmente con el campo eléctrico aplicado su constante de proporcionalidad  $\sigma$  depende del material. Se define  $\rho = 1/\sigma$  resistividad, la inversa de la conductividad.

2) En general, la resistividad eléctrica de los metales aumenta con la temperatura. Si la temperatura  $T$  no varía demasiado, se puede usar una aproximación lineal:

$$\rho = \frac{1}{\sigma} \propto T \quad (\text{ec.8})$$

En la Fig.12 se muestran mediciones de la resistividad eléctrica en función de la temperatura para metales buenos conductores: plata, cobre y oro.



Podemos plantear dos modelos para describir la conducción por electrones en el material:

- 1) los electrones son partículas.
- 2) los electrones se describen como ondas.

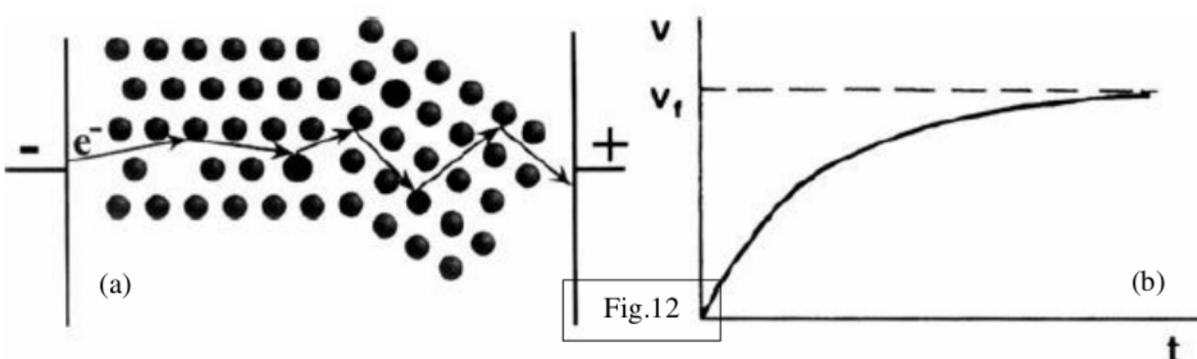
### 1) Este modelo se detalla en la sección 23.2

Como primer aproximación se asume que la conducción es efectuada por el “gas de electrones” conformado por los electrones de valencia de los átomos individuales del cristal. Asume que para un metal monovalente (por ejemplo el sodio) cada átomo contribuye con un electrón a este gas. Se puede calcular entonces del orden de  $10^{22}$  a  $10^{23}$  electrones “libres”/ $\text{cm}^3$  para un metal monovalente. Estos electrones sin campo eléctrico tendrán un movimiento al azar y no hay conducción neta. Si se aplica un campo eléctrico se aceleran constantemente, entonces si se elimina el campo, debieran moverse a velocidad constante a través del cristal. Sin embargo, esto generalmente no se observa, excepto para algunos materiales a temperaturas muy bajas (superconductores).

El modelo de electrones libres necesita un ajuste para tener en cuenta la resistencia eléctrica.

Se describe entonces un movimiento de electrones que es contrarrestado por una fuerza de “fricción” que se opone a la fuerza electrostática  $eE$ . Postulamos que la resistencia en metales y aleaciones se debe a las interacciones de los electrones a la deriva con algunos átomos de la red, es decir, esencialmente con las imperfecciones en la red cristalina (como átomos de impurezas, vacantes, límites de granos, dislocaciones, etc.) (Fig.12a)

Con esta nueva pintura, los electrones se aceleran hasta que se alcanza una velocidad de deriva final  $v_f$  (Fig.12 b). En ese momento, la fuerza del campo eléctrico y la fuerza de fricción son de igual magnitud. Se simula el efecto resistivo como un movimiento en un medio viscoso.



Explica la resistencia como colisiones de los electrones a la deriva, con ciertos átomos de la red. A más colisiones más resistencia. Explica porque aumenta la resistencia  $R$  con la cantidad de imperfecciones de la red. Explica que aumente  $R$  con el aumento de  $T$ . La energía térmica produce oscilaciones de la red alrededor de la posición de equilibrio, por lo que aumenta la probabilidad de colisión con los electrones a la deriva.

Se muestra que se llega a que:

$$j = \frac{Ne^2}{m} \tau E = \sigma E \quad (\text{ec.9}),$$

o sea que  $j$  es proporcional a  $E$  y que la constante depende del material a través de  $N$  el número de electrones disponibles para la conducción.

Para hallar la dependencia  $\sigma(T)$  reescribe  $\tau$  (que representa el tiempo medio entre dos colisiones consecutivas) en términos de la velocidad. Para esta utiliza la energía del continuo tal como se representaría un gas clásico. Es por esto que falla es en la dependencia con la temperatura, obtiene para  $\sigma(T)$  una dependencia como  $T^{-1/2}$  en vez de  $T^{-1}$

## 2) Modelo de electrones libres. Tratamiento cuántico

Al poner un gas de electrones dentro del sólido tenemos que ponerlos en los estados permitidos. Se debe además satisfacer el principio de exclusión de Pauli (dos electrones no pueden tener el mismo conjunto de números cuánticos) Mientras que en la pintura clásica pueden tener cualquier energía. Postular esto obliga cambiar la estadística de distribución de electrones en los distintos estados.

### Estadística de Fermi Dirac

En el suplemento 23.2 se explica cómo se construye esta distribución, satisfaciendo las condiciones pedidas, esta es la distribución de Fermi Dirac y se aplica en sistemas donde vale el principio de exclusión de Pauli:

$$F(E_i) = \frac{1}{1 + \exp\left[\frac{(E_i - E_F)}{k_B T}\right]} \quad (ec\dots) \quad k_B = \text{constante de Boltzman}; E_F = \text{energía de Fermi}$$

Es común escribir  $E$  en vez de  $E_i$ .  $F(E)$  es la probabilidad de ocupación.

**Mostrar que cuando  $T=0K$ ,  $F(E)$  es como la Fig.13**

Se ocupan todos los estados posibles con igual probabilidad, hasta que se acaban los electrones disponibles en el material. El último estado en ocuparse tiene energía  $E_F$ . Esta energía depende del material.

En la Fig.14 se grafica  $F(E)$  a temperatura ambiente para el cobre:

$k_B T(300K)=0.025eV$ ;  $E_F(0K)=7eV$  para Cu

$$F(E) = \frac{1}{1 + \exp\left[\frac{(E - E_F)}{k_B T}\right]} \quad (ec\dots)$$

Se puede observar que  $F(E_F)=1/2$

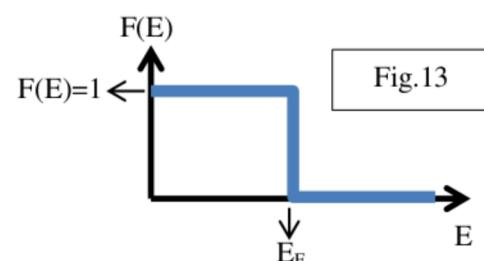


Fig.13

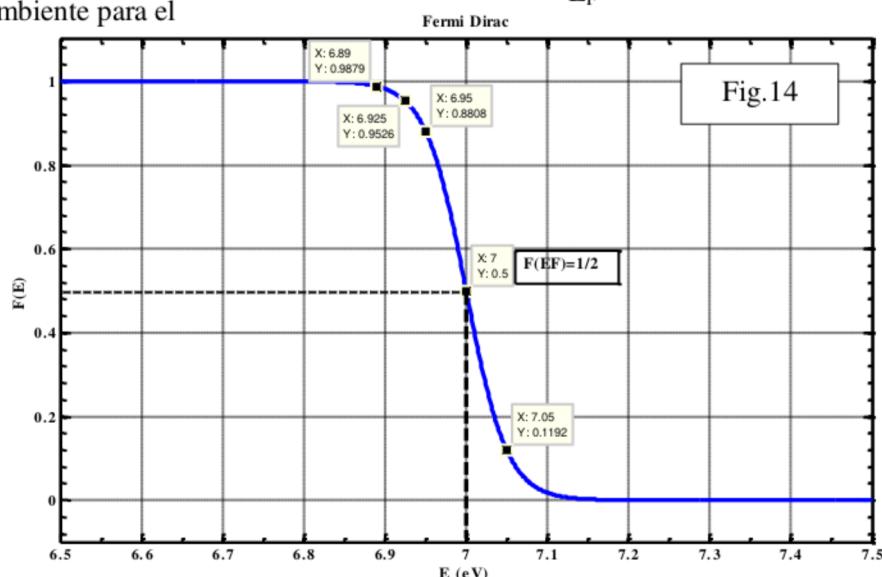


Fig.14

### Hipótesis para modelo cuántico del electrón libre

Mantenemos las hipótesis del tratamiento clásico:

- los electrones de valencia son libres de moverse en el sólido
- solo se toman en cuenta colisiones con los iones de la red. La interacción electrostática entre iones y electrones es ignorada.
- la interacción entre electrones es ignorada.

Se modifica el tratamiento clásico del electrón libre:

- tratamiento cuántico de los electrones  $\Rightarrow$  cuantificar la energía del gas de electrones.
- Los electrones deben obedecer el principio de exclusión de Pauli. Condición satisfecha con la distribución propuesta.

### Eleción de la energía potencial

Estamos interesados en determinar cómo se distribuyen los electrones en los niveles de energía. Restringimos por ahora la discusión a aquellos casos en que los electrones están débilmente ligados al núcleo. Supongamos que los electrones libres (o el "gas de electrones") están confinados en un pozo de potencial cuadrado (caja) del cual no pueden escapar. Elegimos las dimensiones de este pozo potencial igual a las dimensiones del cristal. Nuestro problema es similar al caso de un electrón en un pozo potencial de tamaño a.

Asumamos entonces una energía potencial en 3D, como por ejemplo la calculada para el pozo 3D en (ec.5), donde "a" es el ancho del pozo 3D.

Los niveles de energía están dados por:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \text{ (ec.5),}$$

Definiendo  $E_0 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$  queda  $E_n = E_0(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)$

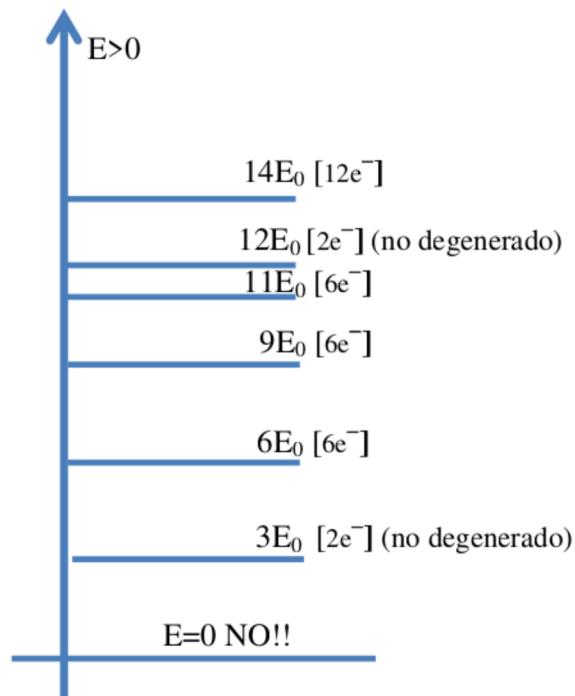
El valor más bajo de energía será para todos los  $n_i=1 \Rightarrow E_{111}=3E_0$

Al haber tres números cuánticos van a existir combinaciones que dan el mismo valor de energía, a estos estados los denominamos "estados degenerados".

Ilustramos en la Tabla I como repartir por ejemplo 34 electrones en los estados permitidos, satisfaciendo el principio de exclusión de Pauli.

Tabla I

# e <sup>-</sup> con igual energía	e <sup>-</sup> /nivel	(n <sub>1</sub> ,n <sub>2</sub> ,n <sub>3</sub> )	E
2e <sup>-</sup>	2e <sup>-</sup>	111	3E <sub>0</sub>
6e <sup>-</sup>	2e <sup>-</sup>	211	6 E <sub>0</sub>
	2e <sup>-</sup>	121	
	2e <sup>-</sup>	112	
6e <sup>-</sup>	2	221	9E <sub>0</sub>
	2	212	
	2	122	
6e <sup>-</sup>	2	311	11E <sub>0</sub>
	2	131	
	2	113	
2e <sup>-</sup>	2	222	12 E <sub>0</sub>
12e <sup>-</sup>	2	321	14 E <sub>0</sub>
	2	312	
	2	132	
	2	123	
	2	213	
	2	231	
TOTAL= 34e <sup>-</sup>			



Esta es la menor energía para distribuir 34 e<sup>-</sup>, correspondiente a T=0K

Si el cálculo fuera clásico para cada e<sup>-</sup>  $\overline{E_{cinética}} = \frac{3}{2} k_B T_{(T=0K)} = 0 \Rightarrow$  cada e<sup>-</sup> tiene energía cero.

Pero cuánticamente por el principio de exclusión, no pueden estar todos en ese nivel.

Cuánticamente se ve que el estado fundamental para el gas (energía más baja T=0K) hace que los electrones se acomoden entre energías 3E<sub>0</sub> y 14E<sub>0</sub>.

Probabilísticamente diremos que a T=0K, la probabilidad que un nivel menor que 14E<sub>0</sub> esté ocupado es 1 y que la probabilidad que un nivel de energía mayor que 14E<sub>0</sub> esté ocupado es cero. Todos estos niveles son posibles y se encuentran desocupados a 0K. El nivel de energía ocupado más alto se lo llama "nivel de Fermi" a T=0K. Para este ejemplo, E<sub>F</sub>(0K)= 14E<sub>0</sub>

A la misma pintura se llega usando la función de distribución de Fermi Dirac F(E), que nos da la probabilidad que un estado con energía E esté ocupado. Esta distribución tiene en cuenta el principio de exclusión y para T=0K es:

$$F(E)_{(0K)} = \begin{cases} 1 & E < E_F \\ 0 & E > E_F \end{cases}$$

### Método para determinar $E_F$ a T=0K

El método descripto en el ejemplo es muy tedioso, sumado a que si el gas de electrones tiene del orden de  $10^{28} \text{ e/m}^3$  se vuelve imposible.

La energía de Fermi,  $E_F$ , es una magnitud importante para estudiar las propiedades electrónicas de los materiales. Las propiedades ópticas, eléctricas o magnéticas, están relacionadas con la ubicación de  $E_F$ .

La energía de Fermi se la define como la "energía más alta que los electrones asumen en T = 0 K". Esto se puede comparar con un recipiente, en la que se vierte una cierta cantidad de agua (electrones). En esta pintura, la superficie superior del agua contenida en este recipiente se compara con la energía de Fermi. Cuantos más electrones se "vientan" en el recipiente, mayor será la energía de Fermi. Los valores numéricos para las energías de Fermi para algunos materiales se encuentran en la Tabla II, por lo general, varían de 2 a 12 eV.

La descripción anterior resulta simple de comprender para lo que estamos resolviendo, pero deberá ser reformulada más adelante, particularmente cuando hablemos de semiconductores.

**Tabla II**

Electronic Properties of Some Metals

Material	Effective mass		Fermi energy, $E_F$ [eV]	Number of free electrons, $N_{\text{eff}}$ [electrons/m <sup>3</sup> ]	Work function (photoelectric), $\phi$ [eV]	Resistivity $\rho$ [ $\mu\Omega \text{ cm}$ ] at 20°C
	$\left(\frac{m^*}{m_0}\right)_{\text{el}}$	$\left(\frac{m^*}{m_0}\right)_{\text{opt}}$				
Ag		0.95	5.5	$6.1 \times 10^{28}$	4.7	1.59
Al	0.97	1.08	11.8	$16.7 \times 10^{28}$	4.1	2.65
Au		1.04	5.5	$5.65 \times 10^{28}$	4.8	2.35
Be	1.6		12.0		3.9	4.0
Ca	1.4		3.0		2.7	3.91
Cs			1.6		1.9	20.0
Cu	1.0	1.42	7.0	$6.3 \times 10^{28}$	4.5	1.67
Fe	1.2				4.7	9.71
K	1.1		1.9		2.2	6.15
Li	1.2		4.7		2.3	8.55
Na	1.0		3.2		2.3	4.20
Ni	2.8				5.0	6.84
Zn	0.85		11.0	$3 \times 10^{28}$	4.3	5.91

El truco para determinar  $E_F$  consiste en armar una red 3D (con ejes  $n_1 n_2 n_3$ ) de puntos en el espacio k, pues  $k_i = n_i \pi / a$ , donde a es el tamaño del cristal.

Para descubrir el truco Ver sección 23.3c

Se llega a una expresión para el nivel de Fermi a T=0K

$$E_F(T=0K) = \frac{\hbar^2}{2m} (3N\pi^2)^{2/3}$$

En el ejemplo 23.2 se la evalúa para el Cu.

### Densidad de estados

Del ejemplo desarrollado en la Tabla I vemos que la diferencia de energía entre dos niveles es de 2 o 3  $E_0$ , donde definimos:

$$E_0 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \quad \text{queda } E_n = (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) E_0 = n^2 E_0$$

Notar que los  $n_i$  son enteros mientras que n puede ser no entero.

Para un cristal de tamaño, por ejemplo de 1cm es  $E_0 \approx 4 \times 10^{-15} \text{ eV}$ , entonces del mismo orden que  $\Delta E$ .

Este razonamiento nos sirve para ver que si bien los niveles son discretos, están suficientemente próximos como para hacer un tratamiento continuo.

El rango de población va desde 0eV hasta por ejemplo  $\approx 7 \text{ eV}$  para el Cu (nivel de Fermi)

Con este argumento consideramos un sistema cuasicontinuo y definimos “densidad de estados energéticos”, lo que nos simplifica los cálculos. Definimos entonces:

$g(E)dE$  Número de estados disponibles con energías entre  $E$  y  $E + dE$

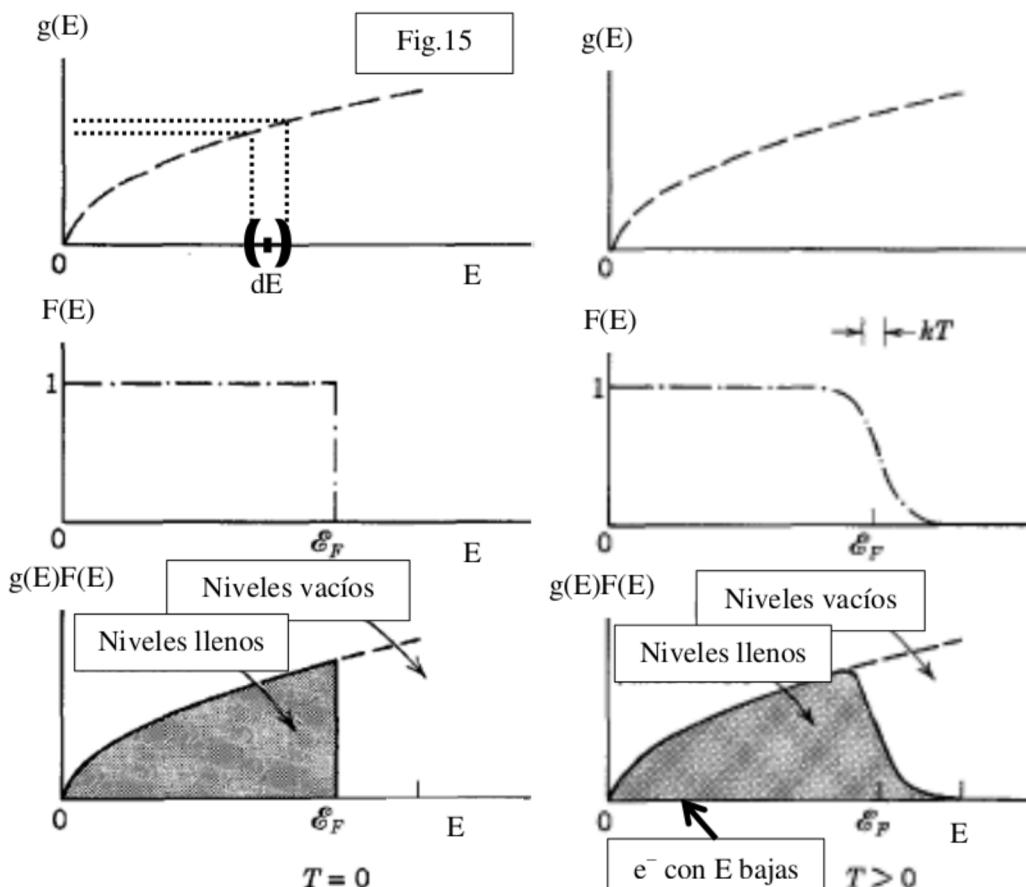
En la sección 23.3d encontrarán los pasos a seguir para determinar  $g(E)$

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

En la Fig.15 se grafica cualitativamente esta función. El número de estados disponibles con energías en el intervalo  $dE$  crece con la energía  $E$ .

El número de electrones que ocupan estos estados queda representado por la función  $N(E)$ , con:  $N(E)dE = g(E)F(E)dE$  (número de estados disponibles en  $dE$ )x (probabilidad de ocupación), que a  $T=0K$  se representa en la Fig.15 izquierda. En la parte de la derecha se representa la distribución de electrones para  $T>0K$ . Vemos que para  $T=0K$  todos los estados con  $E < E_F$  están ocupados y los con  $E > E_F$  vacíos. Este es el estado fundamental del material.

Si se aumenta la temperatura hay una energía térmica disponible  $k_B T$  para los electrones que tratan de moverse a estados de mayor energía. No todos pueden, porque a  $T < T_{\text{fusión}}$  la energía disponible es chica  $\ll E_F$ . Por ejemplo a  $T_{\text{ambiente}}$  es  $k_B T_{300K} = 0.025eV \ll E_F(T=0K) \approx 7eV$ . Como resultado, solo los electrones en un entorno de  $E_F$  sufren transiciones a niveles de mayor energía ya que hay muchos niveles vacíos por arriba de  $E_F$ .



Los electrones con energías más lejos que  $E_F - k_B T$  no pueden cambiar su estado porque no encuentran estados vacíos por el principio de exclusión de Pauli  $\Rightarrow$  la fracción que puede ser excitada es chica. Aún a  $T_{\text{fusión}} \approx 1500K$  es  $k_B T = 0.125eV \ll E_F(T=0K) \approx 7eV$ .

La probabilidad de ocupación  $F(E)$  para  $T < T_{\text{fusión}}$  es muy similar a  $F(E)$  para  $0K$ .

**Energía media.** En el ejemplo 23.3 , al conocer  $N(E)dE$ = el número de electrones que hay en cada intervalo  $dE$ , se puede determinar la energía media por electrón a  $0K$ .

## Conductividad eléctrica $\sigma$ en metales

Noten que el modelo presentado de electrones libres en una caja predice que los electrones se pueden mover libremente dentro de la misma. Por lo tanto no hay nada en este modelo que permita predecir la resistencia eléctrica. Para ello es necesario incluir con que chocan los electrones para sacarlos del estado estacionario. Esto significa en términos de la mecánica cuántica, agregar el potencial correspondiente en la ecuación de Schrödinger. Por esto los libros suelen hacer a esta altura descripciones semicuantitativas donde se predicen algunos parámetros pero no se puede llegar a una solución completa. **No recomiendo leer estos temas (sección 23.3f y siguientes) en este momento.**

Lo que sí se puede ver es que como un electrón no puede cambiar de estado si no encuentra un estado libre (principio de exclusión de Pauli), si se quiere mover electrones por ejemplo hacia la derecha aplicando un pequeño campo eléctrico, solo los electrones cercanos al nivel de fermi encontrarán estados de mayor energía disponibles para ser acelerados. Es por esto que lo que sí predice correctamente el modelo simplificado presentado es que solo una pequeña fracción de electrones cerca del nivel de Fermi contribuye a la conducción. Por lo tanto la conductividad eléctrica será proporcional a la densidad de portadores (densidad de estados ocupados) en el nivel de Fermi.

El modelo de electrones libres que hemos utilizado ignora los efectos de los electrones que interactúan con la red cristalina, debemos tomar en cuenta la variación periódica en el potencial. Un primer acercamiento al problema es resolver la ecuación de Schrödinger para un potencial como el del a Fig.10. Con estos cambios se obtendrá una descripción más realista de los niveles de energía permitidos y en consecuencia de la función que describe la densidad de estados. Explicar propiedades físicas relacionadas con el transporte (calor, electricidad, etc.) requerirá de otros pasos subsiguientes que incluyan las imperfecciones del cristal como por ejemplo impurezas, vibraciones de la red y sus dependencias con la temperatura.

Con referencia a la pg 370 García, Damask

Discutir hipótesis usadas para electrón libre. ¿Cuál es la pintura para la conducción?

Discutir el modelo mecano cuántico de Sommerfeld: que restricciones impone al modelo anterior?

¿Cuál es el potencial usado en la ecuación de Schrödinger y por qué?

Discutir significado de: función de distribución de Fermi y Densidad de estados.