

Clase Auxiliar 27 de Septiembre
Teoría de Bandas
Ejercicios

P1. Cierta sólido cristalino unidimensional está compuesto de átomos X, cuya estructura electrónica de la última capa es $(ns)^2$. Se sabe que la energía de los orbitales ns es de $-30[eV]$ y la de los orbitales np es de $-10[eV]$ y que ambos orbitales forman bandas en el cristal. Si V es la energía de interacción entre 2 vecinos inmediatos, entonces el ancho de una banda (ns) o (np) es cuatro veces este valor y se distribuye simétricamente con respecto al valor de la energía del orbital correspondiente. Asimismo la energía de interacción entre orbitales vecinos del mismo tipo es

$$V_{ss} = \frac{2}{R_0} [eV] \quad V_{pp} = \frac{4}{R_0} [eV]$$

inversamente proporcional a su distancia (R_0).

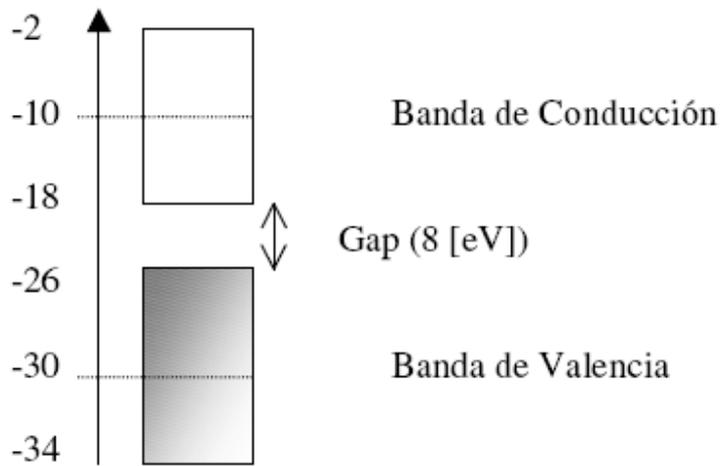
- a) ¿Será conductor si la separación entre vecinos es $R_0=1$?**
- b) Si no lo fuera. ¿A qué distancia R_0 se convierte en conductor?**
- c) Si fuera conductor- ¿A qué distancia deja de serlo?.**

Solución:

El sólido tiene configuración electrónica $(ns)^2$, por lo que está en el grupo IIA (Berilio, Magnesio, Calcio, etc...). Recordemos que en la teoría de bandas, a diferencia de lo que ocurría con los $(ns)^1$, los $(ns)^2$ se traslapaban con los orbitales np para tener una banda de conducción. Entonces la banda de valencia corresponde a los orbitales s y la banda de conducción a los orbitales p.

$$V_{ss} = \frac{2}{1} = 2[eV] \quad V_{pp} = \frac{4}{1} = 4[eV]$$

Entonces, el ancho de banda para orbitales s es $4 \cdot 2 = 8$, y para orbitales p es $4 \cdot 4 = 16$.
Con esto construimos el diagrama de bandas.



La banda de valencia está separada de la banda de conducción, por lo tanto el metal X no es conductor cuando la separación entre átomos es $R_0=1$. Para que sea conductor, la banda de conducción debe estar al lado de la banda de valencia (se tocan). La distancia en que se vuelve conductor es:

$$-10 + \frac{4}{2} \left(\frac{4}{R_0} \right) = -30 + \frac{4}{2} \left(\frac{2}{R_0} \right)$$

$$-10 \cdot R_0 - 8 = -30 \cdot R_0 + 4$$

$$20 \cdot R_0 = 12$$

$$R_0 = 0.6$$

Si a $R_0=0.6$ es conductor, a una distancia mayor que esta, el metal X deja de serlo.

P2. Use la teoría de bandas para explicar el por qué al aumentar la temperatura, irradiar con luz o añadir una impureza; se aumenta la conductividad de un semiconductor.

Solución:

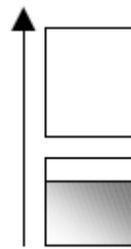
a) Al aumentar la Temperatura, estamos agregando energía al sistema. Con esto aumentan los electrones de la banda de valencia adquieren energía suficiente para saltar a la banda de conducción.

b) Al irradiar con luz, se produce el efecto fotoeléctrico.

c) Al agregar impurezas estamos *dopando* al semiconductor.



Tipo n



Tipo p