

1. Introducción a la Física Electrónica

1.2 Átomos y electrones

- 👉 Importancia de modelos físicos en el desempeño de dispositivos
- 👉 Estructura de los átomos
- 👉 Interacción de átomos con electrones

■ Modelos Físicos

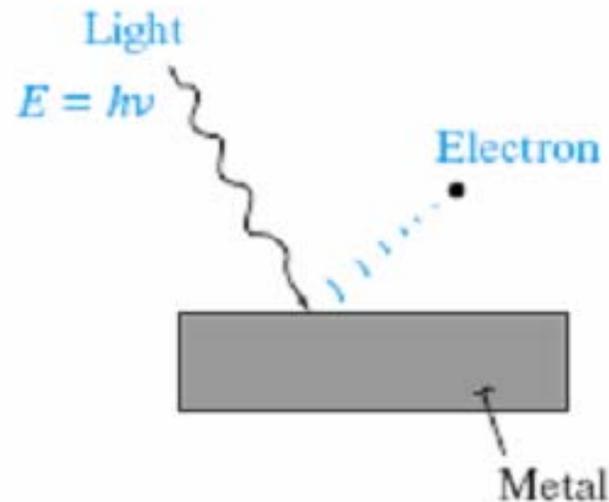
- Teoría atómica, mecánica cuántica y modelos del electrón, son importantes para entender el comportamiento de los dispositivos de estado sólido.
- Fenómenos como el transporte del electrón en un dispositivo electrónico se entienden a través del conocimiento de la interacción del electrón con la red cristalina.
- Propiedades del electrón — estructura electrónica de los átomos e interacción de átomos y electrones cuando son excitados (absorción y emisión de luz).

- Observaciones experimentales llevaron a conceptos modernos del átomo.
- Experimentos para el desarrollo de la teoría cuántica – llevados a cabo con la interacción de luz con materia.
- Estudiando las energías del electrón en un átomo se entiende la influencia de la red en los electrones que participan en el flujo de corriente a través del sólido.
- Interacción luz–electrones – base para la descripción de cambios en conductividad de un semiconductor con excitación óptica, propiedades de dispositivos sensibles a la luz y láseres.

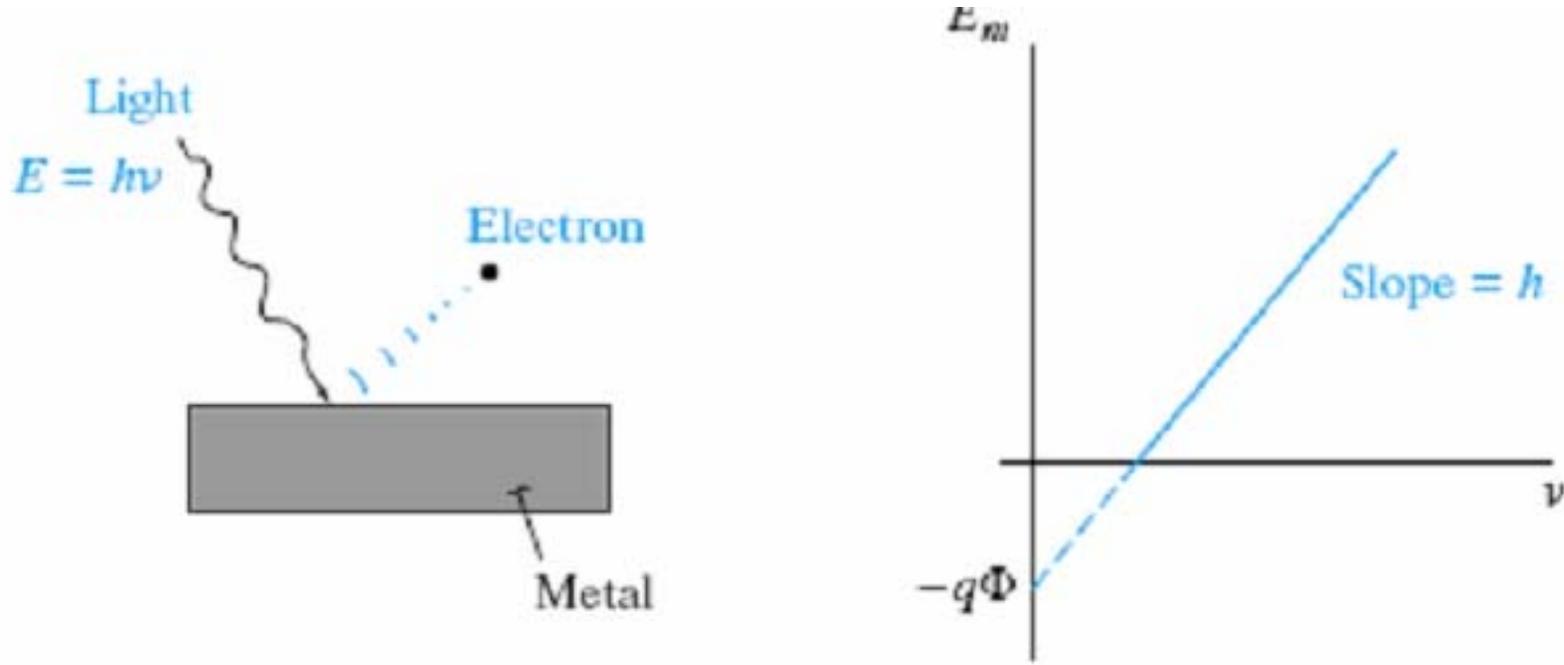
■ Efecto Fotoeléctrico

- Una observación importante realizada por Planck indica que la radiación proveniente de un cuerpo caliente, conocida como radiación de cuerpo negro, es emitida en unidades discretas de energía llamados “cuantos”, descrita por $h\nu$ donde ν es la frecuencia de radiación, y h es la constante de Planck

($h = 6.63 \times 10^{-34}$ J·s)



- Después del desarrollo de esta hipótesis, Einstein interpretó un experimento importante que claramente demuestra la naturaleza discreta de la luz (cuantización). Este experimento involucra la absorción de energía óptica por electrones en un metal y la relación entre la cantidad de energía absorbida y la frecuencia de la luz.
- Suponiendo que luz monocromática incide sobre la superficie de un metal, los electrones en el metal absorben energía de la luz y, algunos electrones reciben suficiente energía para ser expulsada de la superficie del metal hacia el vacío. Este fenómeno es conocido como Efecto Fotoeléctrico.



$$E_m = h\nu - q\Phi$$

q – carga del electrón

Φ – constante característica del metal usado

- Este experimento demuestra claramente que la hipótesis de Planck es correcta, la energía de la luz está contenida en cantidades discretas en vez de una distribución continua de energías.
- Otros experimentos también indican que de acuerdo con la naturaleza de la luz, la cuantización de la energía de luz puede considerarse como paquetes localizados de energía, llamados fotones.

$$E = h \nu$$

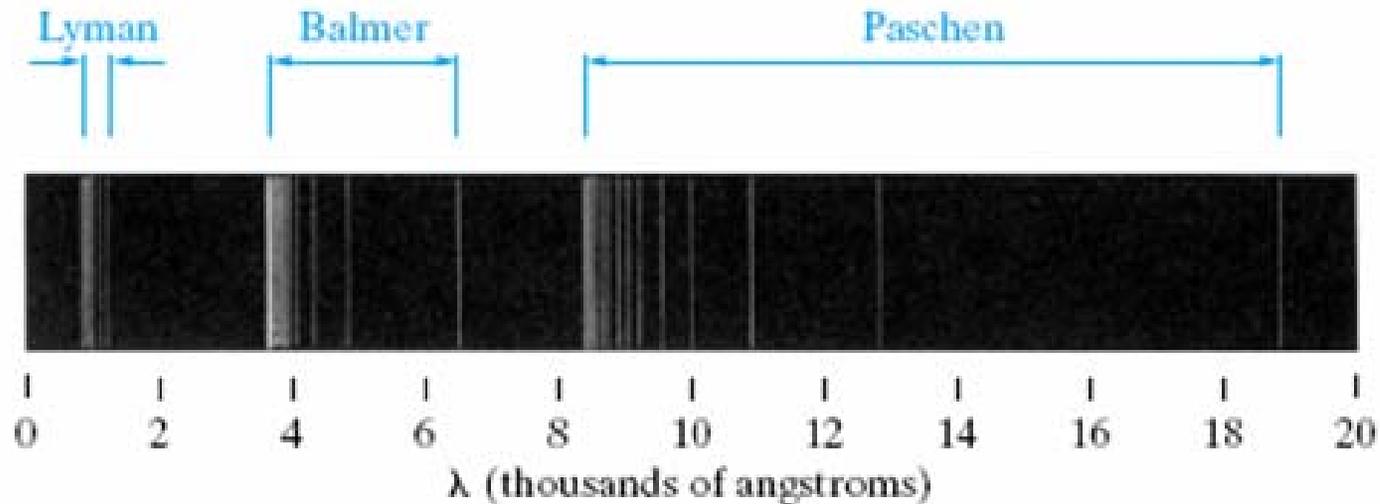
- Algunos experimentos enfatizan la naturaleza de la luz, mientras que otros experimentos revelan que naturaleza discreta de los fotones. Esta dualidad onda-partícula es fundamental en el proceso cuántico y no una ambigüedad en la teoría. Basado en la dualidad onda-partícula de la luz, Louis de Broglie propuso que las partículas de materia (como los electrones) pueden manifestar un carácter de onda en ciertos experimentos. Esta observación fue confirmada por la difracción de electrones en arreglos periódicos de átomos en un cristal observado por Davisson y Germer. De Broglie propuso que una partícula de momento $p = m v$ tiene un longitud de onda dada por

$$\lambda = h/p = h/m v$$

- Las relaciones de Planck y de De Broglie son fundamentales en física cuántica y son válidas para todas la situaciones y objetos, incluyendo fotones y electrones.

■ Espectro Atómico

- Uno de los experimentos más representativos de la física moderna es el análisis de la absorción y emisión de luz por átomos.
- Lámparas de neón – tubo de vidrio lleno con neón o mezcla de gases, con electrodos para crear una descarga. Si la intensidad de la luz emitida es medida como una función de la longitud de onda, se puede encontrar una serie de líneas en vez de una distribución continua de longitudes de onda.

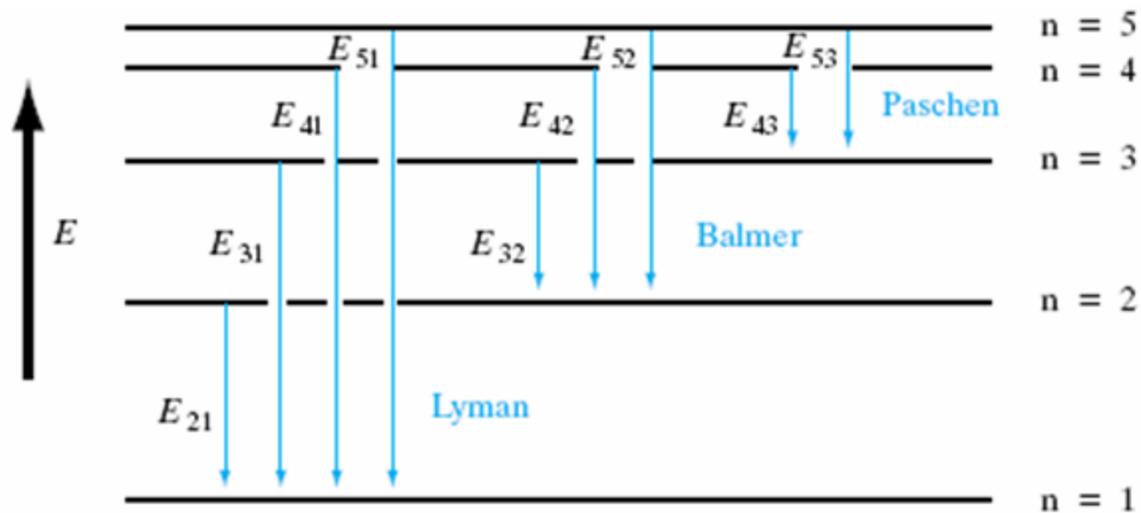


- Dichas líneas aparecen en varios grupos denominados de series de *Lyman*, *Balmer* y *Paschen*. Una vez que el espectro de hidrógeno fue establecido, se establecieron relaciones entre las líneas. Las diversas series en el espectro fueron observadas de forma empírica.

$$\textit{Lyman}: \quad \nu = cR \left[\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right] \quad n = 2, 3, 4, \dots$$

$$\textit{Balmer}: \quad \nu = cR \left[\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right] \quad n = 3, 4, 5, \dots$$

$$\textit{Paschen}: \quad \nu = cR \left[\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right] \quad n = 4, 5, 6, \dots$$



R – constante de Rydberg (109.678 cm^{-1})

Si la energía del fotón $h\nu$ es graficada para valores sucesivos de un entero n , se observa que cada energía puede obtenerse tomando la suma y diferencia de otra energía de fotón en el espectro.

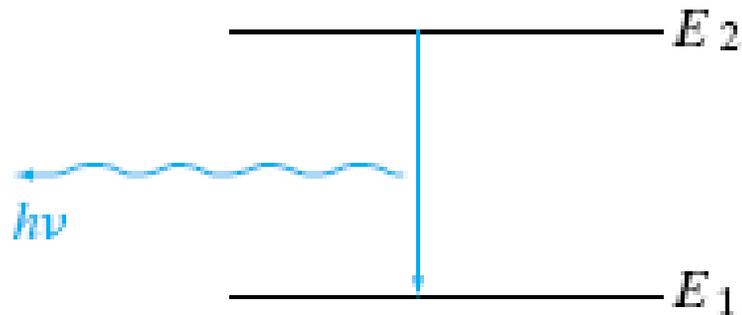
La relación entre las diversas series es llamado como principio de combinación de Ritz.

■ El Modelo de Bohr

- Los resultados del espectro de emisión llevaron a Niels Bohr a construir un modelo para el átomo de hidrógeno, basado en la matemática de sistemas planetarios. Para desarrollar el modelo, Bohr hizo varios postulados:
 1. Los electrones existen en orbitas circulares estables cerca del núcleo.
 2. El electrón podría cambiar a una órbita de mayor o menor energía, ganando o perdiendo energía igual a la diferencia en los niveles (por absorción o emisión de un fotón de energía $h\nu$).

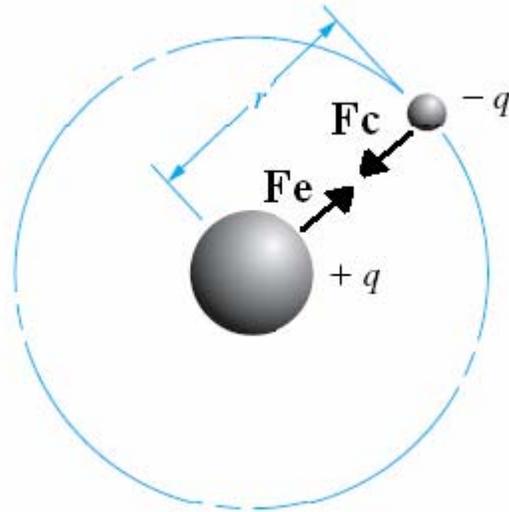
3. El momento angular p_θ del electrón en una órbita es siempre un múltiplo entero de la constante de Planck dividido por 2π ($h/2\pi$ se abrevia \hbar por conveniencia)

$$p_\theta = n\hbar, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$



$$h\nu = E_2 - E_1$$

- Visualizando al electrón en una órbita estable de radio r cercano al protón del átomo de hidrógeno, se puede igualar la fuerza electrostática entre las cargas a la fuerza centrípeta:



$$F_e = F_c$$

$$-\frac{q^2}{Kr^2} = -\frac{mv^2}{r}$$

donde

$K = 4\pi\epsilon_0$ en unidades MKS,

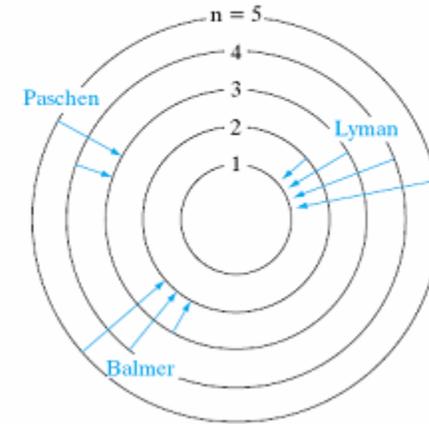
m es la masa del electrón

v es la velocidad del electrón

- La energía total del electrón en la órbita n_{th} es

$$E_n = \text{K. E.} + \text{P. E.} = -\frac{mq^4}{2K^2n^2\hbar^2}$$

Atoms and Electrons



El modelo de Bohr describe aproximadamente las características generales del espectro del hidrógeno, sin embargo no incluye muchos detalles.

El éxito parcial del modelo de Bohr fue un paso importante hacia el desarrollo de la teoría cuántica. El concepto de que los electrones esten cuantizados en ciertos niveles permitidos de energía, y la relación de la energía del fotón y las transiciones entre niveles se establecieron fuertemente por la teoría de Bohr.

■ Mecánica Cuántica

- Los principios de la mecánica cuántica fueron desarrollados a finales de los años 1920s. Una aproximación desarrollada por Heisenberg, emplea matemáticas de matrices y es llamada *mecánica matricial*. Independientemente, Schrödinger desarrolla una aproximación utilizando una ecuación de onda, llamada *mecánica de onda*.

Principio de Probabilidad e Incertidumbre

- En cualquier medida de la posición y momento de una partícula, la incertidumbre en las dos cantidades medidas estará relacionada por

$$(\Delta x) (\Delta p_x) \geq \hbar/2$$

- Similarmente, la incertidumbre en una energía medida estará relacionada a la incertidumbre en el tiempo en la cual la medición fue realizada

$$(\Delta E) (\Delta t) \geq \hbar/2$$

- Estas limitaciones indican que mediciones simultáneas de posición y momento o de energía y tiempo son inherentemente inexactas en cierto grado. La constante de Planck es un número demasiado pequeño y no afecta con la inexactitud en las mediciones de Δx y Δp_x .
- Por otra parte, mediciones de la posición de un electrón y su velocidad están seriamente limitadas por el principio de incertidumbre.
- Una implicación del principio de incertidumbre es que no se puede hablar propiamente de la posición de un electrón, por ejemplo, pero sí de la probabilidad de encontrar un electrón en cierta posición.

■ La Ecuación de Onda de Schrödinger

- La Teoría de Schrödinger especifica las leyes del movimiento ondulatorio que obedecen las partículas de cualquier sistema microscópico.
 - Existen varios caminos para desarrollar la ecuación de onda aplicando conceptos cuánticos a varias ecuaciones de la mecánica clásica. Una de las aproximaciones más simples es considerar una serie de postulados básicos para desarrollar la ecuación de onda, y confiar en la aproximación de los resultados que sirven como una justificación de los postulados.
1. Cada partícula en un sistema físico esta descrita por una función de onda (x, y, z, t) . Esta función y su derivada espacial $(\partial \Psi / \partial x + \partial \Psi / \partial y + \partial \Psi / \partial z)$ son continuas, finitas y evaluadas de manera sencilla.

2. Tratándose de cantidades clásicas como la energía E y el momento p , se deben relacionar estas cantidades con operadores de mecánica cuántica definidos de la siguiente manera:

Classical variable	Quantum operator
x	x
$f(x)$	$f(x)$
$p(x)$	$\frac{\hbar}{j} \frac{\partial}{\partial x}$
E	$-\frac{\hbar}{j} \frac{\partial}{\partial t}$

3. La probabilidad de encontrar una partícula con función de onda Ψ en el volumen $dx dy dz$ es $\Psi^* \Psi dx dy dz$. El producto $\Psi^* \Psi$ esta normalizado de tal forma que

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \Psi dx dy dz = 1$$

Una vez que se encuentra la función de onda Ψ para un partícula, se puede calcular su posición promedio, energía y momento dentro de los límites del principio de incertidumbre.

La mayor parte del esfuerzo en cálculos cuánticos tiene que ver la solución de Ψ con condiciones para un sistema físico particular. Se asume que la función de densidad de probabilidad es $\Psi^* \Psi$, o $|\Psi|^2$.

- La ecuación clásica para la energía de una partícula se puede escribir como:

$$\frac{1}{2m} p^2 + V = E$$

- Usando los operadores cuánticos en tres dimensiones la ecuación se reescribe

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V\Psi = -\frac{\hbar}{j} \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

$$\nabla^2 \Psi \rightarrow \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2}$$

- Y la ecuación independiente del tiempo

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)] \psi(x) = 0$$

■ El Pozo de Potencial

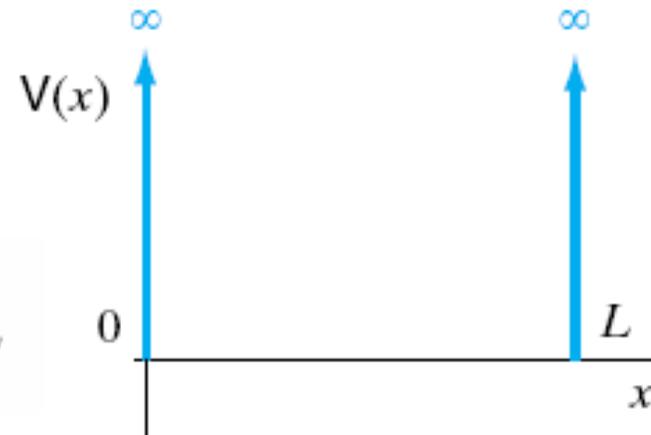
- Es difícil encontrar soluciones a la ecuación de Schrödinger para los potenciales de campo más reales, el problema más simple es la energía del pozo de potencial con $V(x)$ igual a cero excepto en los límites $x = 0$ y L , siendo L una distancia infinita:

$$V(x) = 0, \quad 0 < x < L$$

$$V(x) = \infty, \quad x = 0, L$$

$$V(x) = 0$$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi(x) = 0, \quad 0 < x < L$$



- Soluciones posibles a la ecuación son $\text{sen}kx$ y $\text{cos}kx$, donde k es $[2mE]^{1/2}/\hbar$. Al escoger una solución es necesario examinar las condiciones de frontera. El único valor permitido de Ψ en las paredes es cero. Por otro lado, $|\Psi|^2$ puede ser diferente de cero fuera del pozo de potencial, lo cual es imposible porque una partícula no puede penetrar una barrera infinita. Por lo tanto, se debe escoger únicamente la solución seno y definir k tal que $\text{sen}kx$ tiende a cero en $x=L$:

$$k = \frac{n\pi}{L}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Se puede resolver la energía total E_n para cada valor del entero n :

$$\frac{\sqrt{2mE_n}}{\hbar} = \frac{n\pi}{L}$$

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

- Energía de la partícula para cada valor permitido de n.
- Como la energía esta cuantizada solo ciertos valores son permitidos.
- El entero n se conoce como número cuántico
- La función de onda ψ y la energía de estado E_n describen el estado cuántico de la partí ψ_n .

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi dx = \int_0^L A^2 \left(\sin \frac{n\pi}{L} x \right)^2 dx = A^2 \frac{L}{2}$$

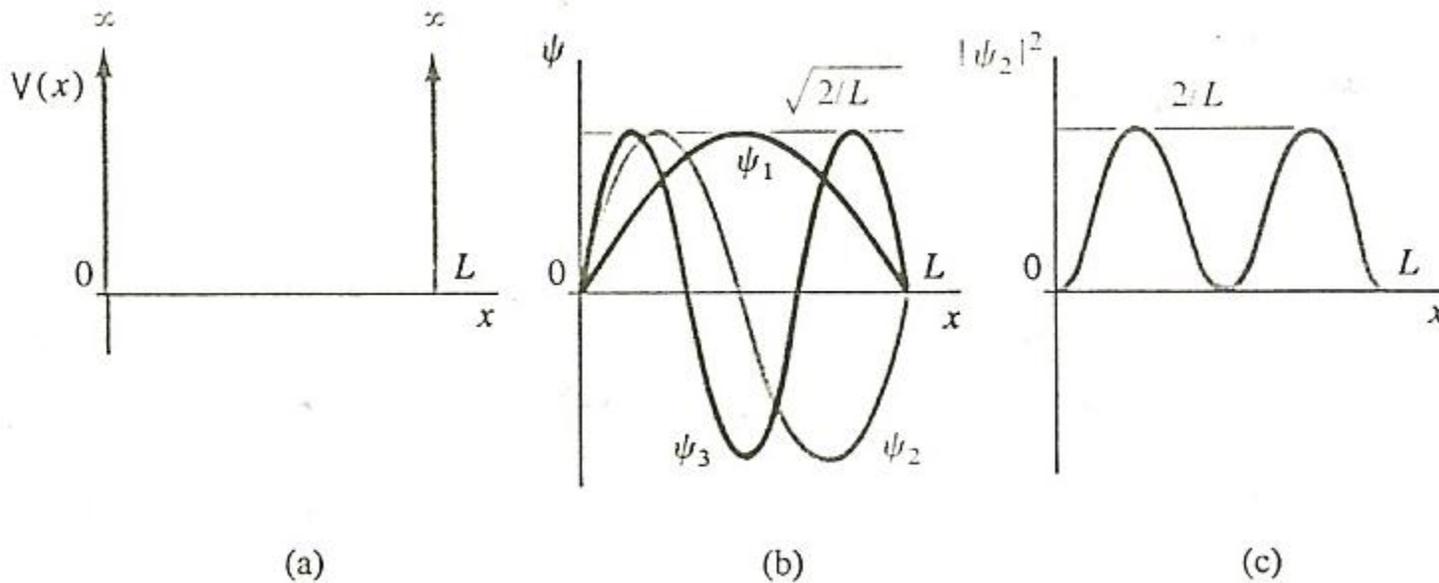
$$A = \sqrt{\frac{2}{L}}, \quad \psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi}{L} x$$

Partícula en pozo de potencial:

a) Diagrama de energía potencial

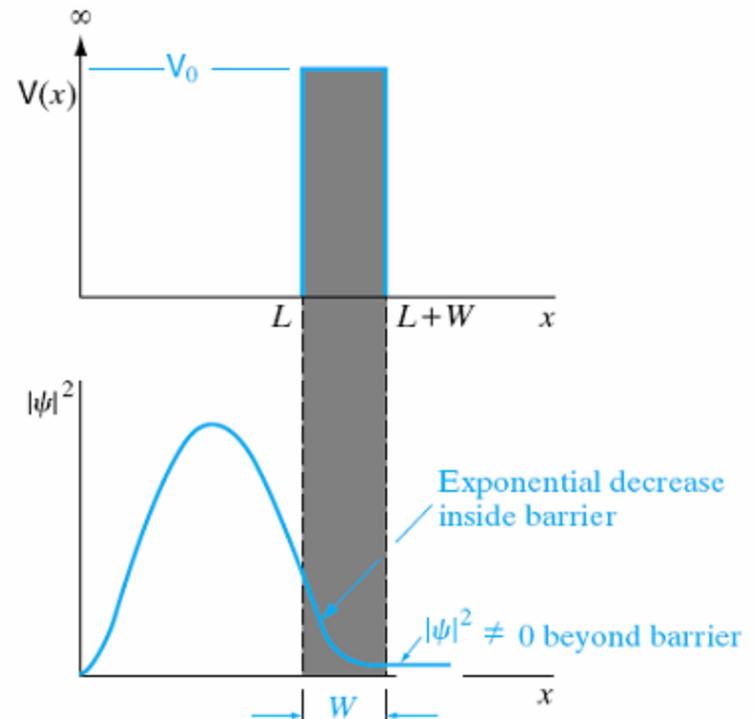
b) Funciones de onda in los tres primeros estados cuánticos

c) Probabilidad de distribución de densidad para el segundo estado



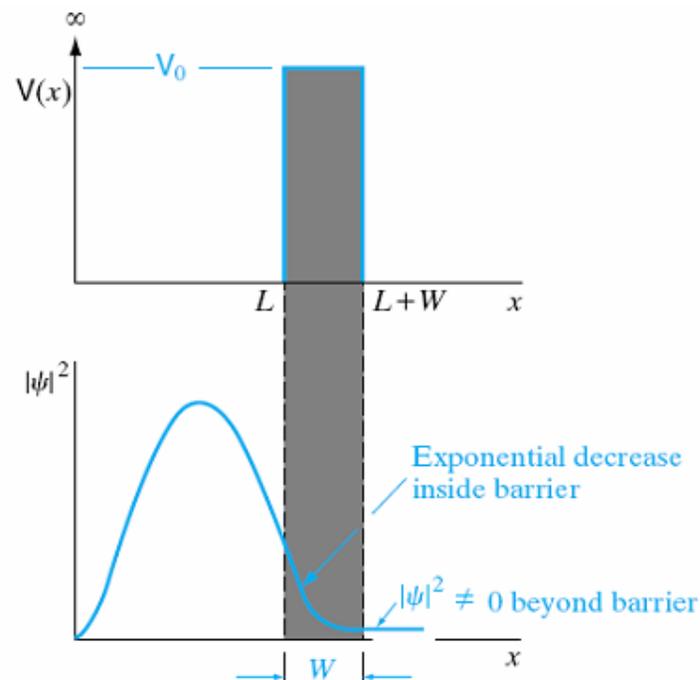
■ Tuneleo

- Las funciones de onda son relativamente fáciles de obtener para el pozo de potencial con paredes infinitas, mientras que las condiciones de frontera establezcan que Ψ es cero en las paredes.
- Una pequeña modificación de este problema ilustra un principio que es muy importante en algunos dispositivos de estado sólido – el tuneleo de mecánica cuántica de un electrón a través de una barrera de altura y espesor infinito.



- Si la barrera no es infinita, las condiciones de frontera no establecen que Ψ sea cero en la barrera. En vez de esto, se debe usar la condición de que Ψ y su pendiente $d\Psi/dx$ sean continuos en cada frontera de la barrera. De esta manera Ψ tiene un valor diferente de cero dentro de la barrera y también en el extremo.
- Debido a que Ψ tiene un valor a la derecha de la barrera, $\Psi^* \Psi$ también existe, lo que implica que exista la probabilidad de encontrar un electrón más allá de la barrera. La partícula no va por arriba de la barrera, su energía total se asume es menor que la altura de potencial V_0 .
- El mecanismo por el cual la partícula “penetra” la barrera, se llama de **tuneldeo**.

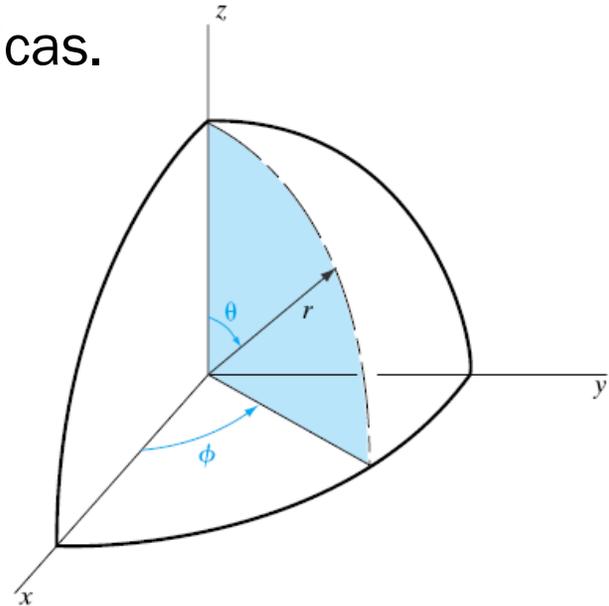
- El tuneleo esta ligado íntimamente al principio de incertidumbre. Si la barrera es lo suficientemente delgada, no se puede decir con certeza que la partícula existe solo de un lado. Sin embargo, la amplitud de la función de onda para la partícula se reduce por la barrera, de tal manera que el espesor W se hace mayor, reduciendo Ψ en el lado derecho al punto de que el tuneleo sea despreciable.
- El tuneleo es importante para dimensiones muy pequeñas, y puede ser muy importante en la conducción de los electrones en sólidos.



■ El Átomo de Hidrógeno

- Encontrar las funciones de onda para el átomo de hidrógeno requiere una solución de la ecuación de Schrödinger en tres dimensiones para un campo de potencial coulombico. Este problema es esféricamente simétrico, por lo que se emplean coordenadas esféricas en los cálculos.
- El término $V(x, y, z)$ se debe reemplazar por $V(r, \theta, \phi)$, que representa el potencial de Coulomb que experimenta el electrón en la vecindad del protón. El potencial de Coulomb varía únicamente con r en coordenadas esféricas.

$$V(r, \theta, \phi) = V(r) = - (4\pi\epsilon_0)^{-1} \frac{q^2}{r}$$



- Cuando se realiza la separación de variables, la ecuación es independiente del tiempo:

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$$

- De este modo las funciones de onda se encuentran en tres partes. Se deben obtener soluciones separadas para la ecuación dependiente de r , ecuación dependiente de θ y ecuación dependiente de ϕ . Después de que se resuelven estas tres ecuaciones, la función de onda se obtiene del producto. Como en el problema de pozo de potencial, cada ecuación da una solución cuantizada.

- Por lo tanto esperamos un número cuántico asociado a cada una de las tres partes de la ecuación de onda.

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_n(r)\Theta_l(\theta)\Phi_m(\phi)$$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

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

$$m = -l, \dots, -2, -1, 0, +1, +2, \dots, +l$$

- Además de los tres números cuánticos obtenidos de las tres partes de la ecuación de onda, existe una condición importante de cuantización sobre el spin del electrón. Investigaciones del spin electrónico emplean la teoría de la relatividad así como la mecánica cuántica; por lo tanto, solo afirmaremos que el momento angular s de un electrón con nlm es:

$$s = \pm \frac{\hbar}{2}$$

- Esto es, el electrón tiene un spin de $\frac{1}{2}$, y el momento angular producido por este spin es positivo o negativo dependiendo si el electrón esta con spin hacia arriba o hacia abajo.
- Cada estado de energía permitido del electrón en el átomo de hidrógeno es descrito únicamente por cuatro números cuánticos: n , l , m y s .

■ La Tabla Periódica

- Los números cuánticos n , l , m y s surgen de las soluciones al problema del átomo de hidrógeno. Por lo tanto las energías que se obtienen de las funciones de onda son únicas para el átomo de hidrógeno y no se pueden extender a átomos más complicados sin modificaciones considerables.
- Sin embargo, las reglas de selección de números cuánticos son válidas para estructuras más complicadas, siendo posible entender el arreglo de los átomos en la tabla periódica de los elementos químicos.
- Antes de abordar la tabla periódica, se debe estar concientes de un principio importante de la teoría cuántica, el principio de exclusión de Pauli. Esta regla establece que no más de dos electrones en un sistema pueden tener la misma serie de números cuánticos.

Números cuánticos en $n=3$ y estados permitidos para el electrón en un átomo de hidrógeno

n	l	m	s/ħ	Allowable states in subshell	Allowable states in complete shell
1	0	0	$\pm \frac{1}{2}$	2	2
2	0	0	$\pm \frac{1}{2}$	2	8
	1	-1	$\pm \frac{1}{2}$	6	
		0	$\pm \frac{1}{2}$		
3	0	0	$\pm \frac{1}{2}$	2	18
	1	-1	$\pm \frac{1}{2}$	6	
		0	$\pm \frac{1}{2}$		
2	1	1	$\pm \frac{1}{2}$	10	
		0	$\pm \frac{1}{2}$		
		-1	$\pm \frac{1}{2}$		
		2	$\pm \frac{1}{2}$		
		1	$\pm \frac{1}{2}$		

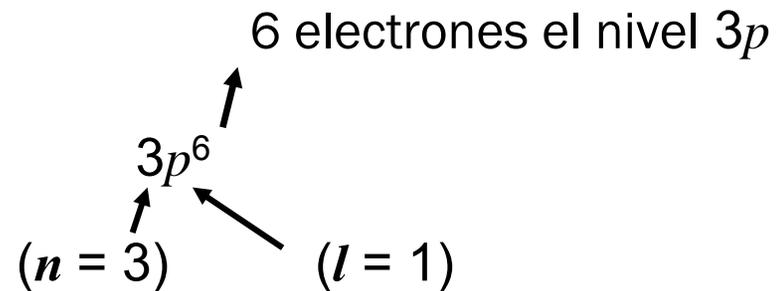
Atomic number (Z)	Element	Number of electrons						Shorthand notation	
		n = 1 l = 0		2		3			4
		1s	2s 2p	3s 3p	3d	4s	4p		
1	H	1						1s ¹	
2	He	2						1s ²	
3	Li		1					1s ² 2s ¹	
4	Be		2					1s ² 2s ²	
5	B	helium core, 2 electrons	2	1				1s ² 2s ² 2p ¹	
6	C		2	2				1s ² 2s ² 2p ²	
7	N		2	3				1s ² 2s ² 2p ³	
8	O		2	4				1s ² 2s ² 2p ⁴	
9	F		2	5				1s ² 2s ² 2p ⁵	
10	Ne		2	6				1s ² 2s ² 2p ⁶	
11	Na			1				[Ne] 3s ¹	
12	Mg			2				3s ²	
13	Al	neon core, 10 electrons	2	1				3s ² 3p ¹	
14	Si		2	2				3s ² 3p ²	
15	P		2	3				3s ² 3p ³	
16	S		2	4				3s ² 3p ⁴	
17	Cl		2	5				3s ² 3p ⁵	
18	Ar		2	6				3s ² 3p ⁶	
19	K				1			[Ar] 4s ¹	
20	Ca				2			4s ²	
21	Sc			1	2			3d ¹ 4s ²	
22	Ti			2	2			3d ² 4s ²	
23	V			3	2			3d ³ 4s ²	
24	Cr			5	1			3d ⁵ 4s ¹	
25	Mn			5	2			3d ⁵ 4s ²	
26	Fe			6	2			3d ⁶ 4s ²	
27	Co			7	2			3d ⁷ 4s ²	
28	Ni			8	2			3d ⁸ 4s ²	
29	Cu			10	1			3d ¹⁰ 4s ¹	
30	Zn			10	2			3d ¹⁰ 4s ²	
31	Ga			10	2	1		3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹	
32	Ge			10	2	2		3d ¹⁰ 4s ² 4p ²	
33	As			10	2	3		3d ¹⁰ 4s ² 4p ³	
34	Se			10	2	4		3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁴	
35	Br			10	2	5		3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁵	
36	Kr			10	2	6		3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁶	

Notación para valores de l

$$l = 0, 1, 2, 3, 4, \dots$$

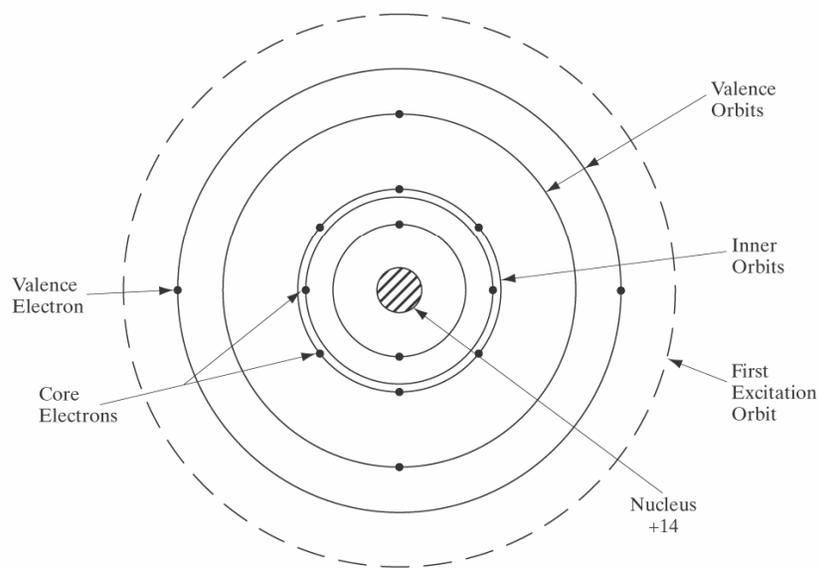
$$s, p, d, f, g, \dots$$

Convención creada por físicos experimentales quienes refirieron a los primeros cuatro grupos espectrales como **sharp**, **principal**, **diffuse**, y **fundamental**. Orden alfabético se usa después de f . Con esta convención para l , se puede escribir el estado electrónico de la siguiente manera:

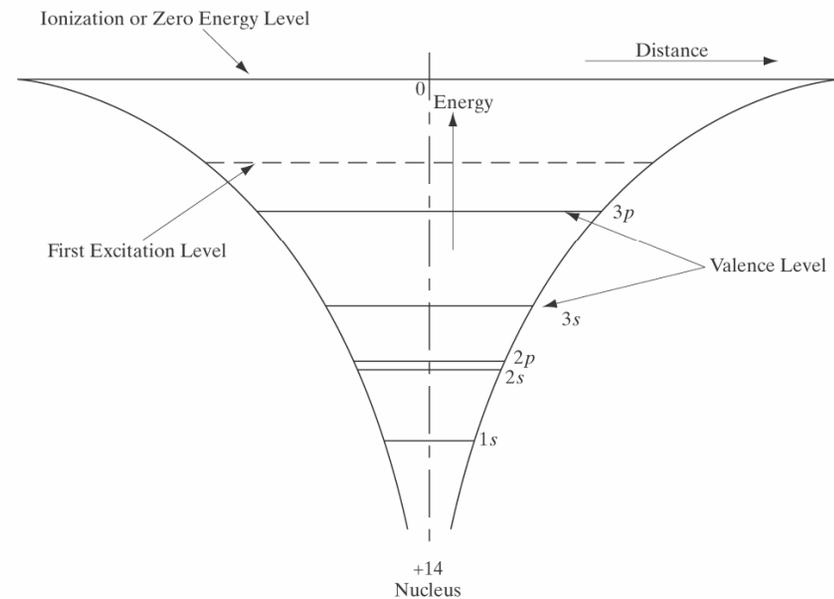


Estructura electrónica y niveles de energía en un átomo de Si

$Z=14$, estado base $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$



Modelo orbital



Niveles de energía