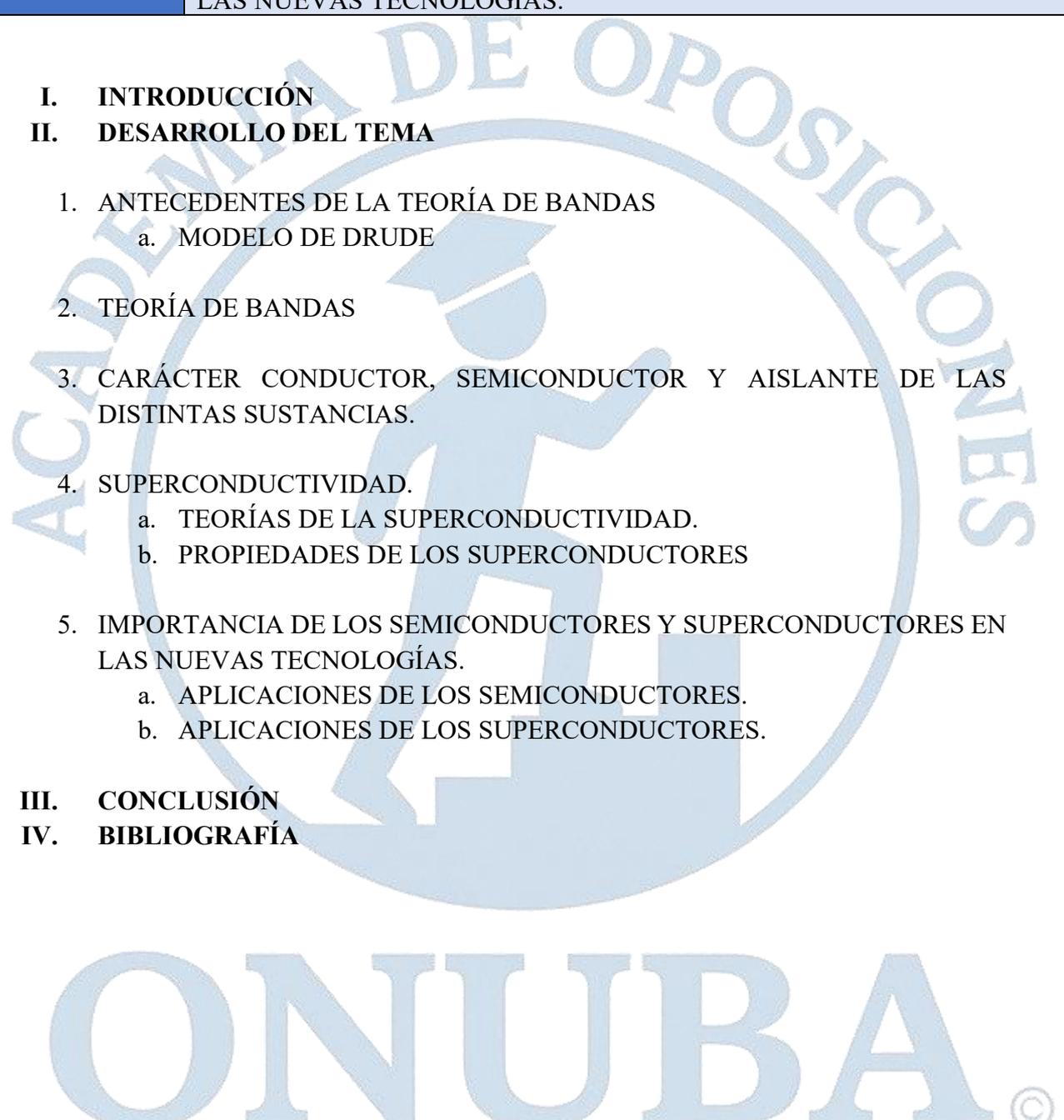


TEMA 45

TEORÍA DE BANDAS. CARÁCTER CONDUCTOR, SEMICONDUCTOR Y AISLANTE DE LAS DISTINTAS SUSTANCIAS. SUPERCONDUCTIVIDAD. IMPORTANCIA DE LOS SEMICONDUCTORES Y SUPERCONDUCTORES EN LAS NUEVAS TECNOLOGÍAS.

- 
- I. INTRODUCCIÓN**
  - II. DESARROLLO DEL TEMA**
    1. ANTECEDENTES DE LA TEORÍA DE BANDAS
      - a. MODELO DE DRUDE
    2. TEORÍA DE BANDAS
    3. CARÁCTER CONDUCTOR, SEMICONDUCTOR Y AISLANTE DE LAS DISTINTAS SUSTANCIAS.
    4. SUPERCONDUCTIVIDAD.
      - a. TEORÍAS DE LA SUPERCONDUCTIVIDAD.
      - b. PROPIEDADES DE LOS SUPERCONDUCTORES
    5. IMPORTANCIA DE LOS SEMICONDUCTORES Y SUPERCONDUCTORES EN LAS NUEVAS TECNOLOGÍAS.
      - a. APLICACIONES DE LOS SEMICONDUCTORES.
      - b. APLICACIONES DE LOS SUPERCONDUCTORES.
  - III. CONCLUSIÓN**
  - IV. BIBLIOGRAFÍA**

## I. INTRODUCCIÓN

La capacidad de los materiales para conducir la corriente eléctrica es una propiedad fundamental que define en gran medida su utilidad en el mundo tecnológico. Desde los cables que transportan energía hasta los microchips que usan nuestros móviles para procesar la información, el comportamiento eléctrico de las sustancias es clave.

Las modernas teorías del enlace metálico han permitido entender el comportamiento de estos materiales, especialmente los semiconductores y superconductores, siendo estos pilares de la revolución tecnológica del último siglo.

En este tema se tratan las teorías que justifican el enlace metálico, progresando hasta el conocimiento de semiconductores y superconductores, haciendo un análisis de sus aplicaciones más frecuentes.

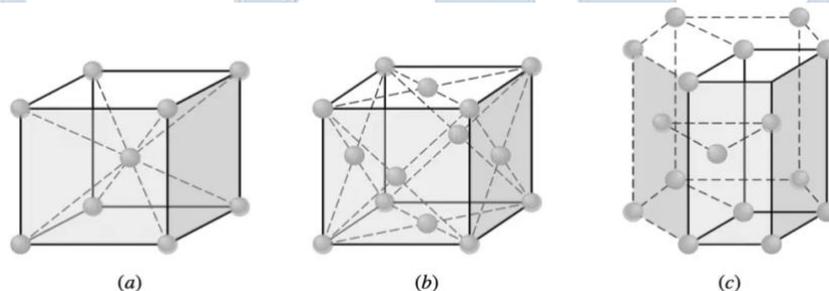
## II. DESARROLLO DEL TEMA

### 1. ANTECEDENTES DE LA TEORÍA DE BANDAS

En los elementos metálicos, los átomos tienden a unirse entre sí para formar redes cristalinas, en las que estos átomos metálicos permanecen unidos fuertemente.

Gracias a métodos como la difracción de rayos X se puede observar que los metales se presentan de tres formas estructurales generales:

- Cúbica Centrada en el Cuerpo (BCC, del inglés *Body-Centered Cubic*).
- Cúbica Centrada en las Caras (FCC, *Face-Centered Cubic*).
- Hexagonal (HCP, *Hexagonal close-packed*)



La unión entre átomos no se puede explicar por fuerzas intermoleculares (ya que no tiene naturaleza iónica) ni por enlace covalente (por el alto número de coordinación de la estructura cristalina que se forma) o iónico, por lo que se requiere de una teoría que permita explicar el enlace metálico.

#### a. MODELO DE DRUDE

Antes de la llegada de la Teoría de Bandas, los primeros intentos de explicar la conductividad eléctrica en los metales se basaban en los modelos clásicos. No es hasta principios del siglo XX que de la mano de Drude se propuso el también

conocido como el modelo de “gas de electrones”, que trataba de imaginar los electrones de la capa de valencia del metal como un gas libre que se podía mover de forma caótica, permitiéndoles “chocar” con los iones fijos de la red cristalina. Para poder explicar las propiedades metálicas supone:

- En la estructura del metal, los átomos han perdido sus electrones de valencia y se han convertido en cationes esféricos.
- Los cationes forman una red de esferas tridimensional con estructura cristalina, que forma un campo eléctrico uniforme.
- Los electrones de valencia dejan de pertenecer al átomo del que provienen y pasan a pertenecer al cristal entero, rodeando la red positiva y neutralizando a esta, de forma que parece un gas con libertad de movimiento.
- Los electrones se mueven de forma libre, pero no pudiendo escapar de la red de cationes por el potencial eléctrico atractivo.

Con este modelo se puede explicar la conducción eléctrica y térmica de los metales y la Ley de Ohm, pero presenta ciertas limitaciones a la hora de explicar si un material es buen conductor o aislante; o explicar la existencia de los semiconductores.

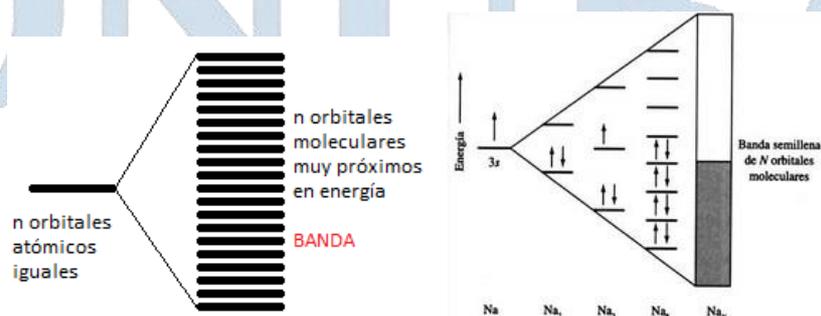
## 2. TEORÍA DE BANDAS

No fue hasta la revolución de la mecánica cuántica que el modelo de Drude no se abandonó, gracias a tener en cuenta la naturaleza ondulatoria del electrón y el principio de exclusión de Pauli, revelando que los electrones no podían tener cualquier nivel de energía (estando libres como propuso Drude), estando sus energías permitidas agrupadas en bandas, separadas por brechas (o *gaps*).

La teoría de bandas es una aproximación de la teoría de orbitales moleculares aplicada a los orbitales del propio metal.

Al unirse dos átomos, se originan dos orbitales moleculares por superposición de orbitales atómicos; si se unen tres, se originan tres orbitales moleculares... Por lo que si se unen  $N$  átomos, se superponen  $N$  orbitales atómicos, obteniéndose  $N$  orbitales moleculares.

Como cada orbital tiene un valor energético asociado y, en el caso particular de los metales, estos niveles energéticos están tan cerca que dan lugar a una banda de valores de energía.

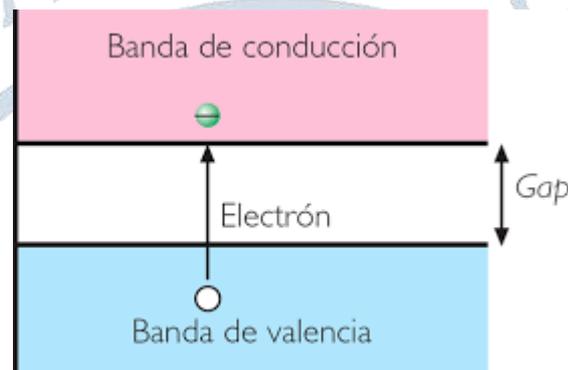


La banda con menor energía queda llena con los  $N$  electrones comunes a los átomos.

A la banda con menor energía se le denomina banda de valencia. Es la que queda llena de electrones.

A la banda con mayor energía y que no tiene electrones se le denomina como banda de conducción.

Entre la banda de valencia y la banda de conducción puede haber una zona de energías prohibidas o pueden encontrarse ambas bandas separadas, sin darse una brecha o discontinuidad. A esta brecha se le conoce como *band-gap*.



La conductividad eléctrica depende del movimiento de los electrones a través de la estructura del cristal, bajo los efectos de un campo electromagnético aplicado.

Este movimiento solo se podrá producir si los electrones pueden aceptar energía y pasar así a niveles desocupados accesibles, mientras que los materiales aislantes presentan todos los niveles accesibles totalmente llenos, imposibilitando la conductividad.

### 3. CARÁCTER CONDUCTOR, SEMICONDUCTOR Y AISLANTE DE LAS DISTINTAS SUSTANCIAS.

En los cristales metálicos la banda de conducción (la de mayor energía) se superpone con la banda de valencia (la de menor energía), de forma que los electrones situados en esta pueden fácilmente pasar a la de conducción, quedando deslocalizados y pudiendo moverse con libertad entre los átomos metálicos.

Esta movilidad se debe a que los orbitales moleculares que se han formado están extendidos a toda la red de átomos.

Por lo que, según el modelo de bandas electrónicas, cuando una banda parcialmente llena se superponga con una vacía, se puede afirmar que se trata de una sustancia conductora, explicando así el enlace y conductividad eléctrica de los metales.

Para ello los electrones del metal se deben excitar hacia los orbitales deslocalizados que no se encuentran llenos de la misma banda, mediante una diferencia de potencial.



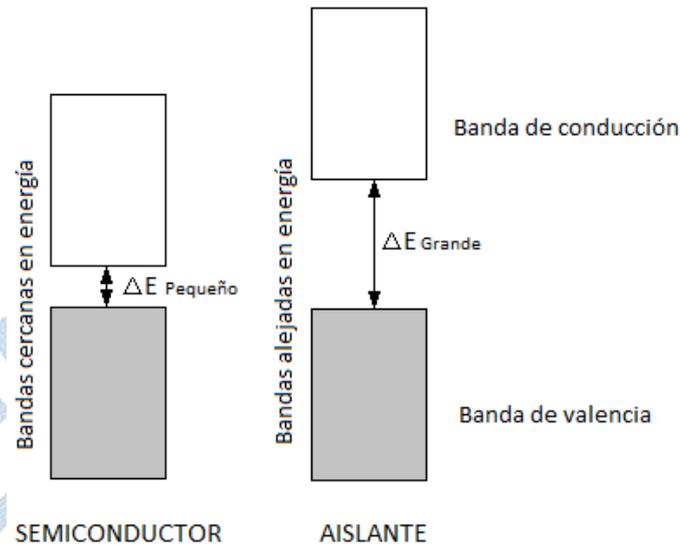
La conducción en los metales se ve condicionada por una resistencia eléctrica, causada por los choques de los electrones con los iones positivos de la red, los cuales tienen energía cinética que aumenta con la temperatura.

Por ello, la conductividad eléctrica de los metales disminuye con el aumento de la temperatura.

El berilio (Be) y el litio (Li) son casos especiales:

- El litio presenta una configuración  $1s^2 2s^1$ , presentando su electrón de valencia en el orbital 2s. El solapamiento de los orbitales atómicos 2s crea una banda 2s de energía continua, pero como cada átomo de litio aporta un electrón y cada orbital atómico puede albergar como máximo dos electrones (espín “arriba” y espín “abajo”); va a ocurrir que la banda 2s se queda llena a la mitad (semillena), quedando estados vacíos cercanos, pudiendo originarse un flujo de los electrones.
- El berilio presenta configuración electrónica  $1s^2 2s^2$ , con dos orbitales de valencia que llenan por completo el orbital 2s. Si siguiéramos el razonamiento anterior, la banda 2s se quedaría completamente llena y tendría que saltar por el *band-gap* hasta la banda 2p que está vacía, lo cual lo haría aislante. Sin embargo, lo que ocurre es que debido a la estructura cristalina y la corta distancia entre los átomos de berilio, la energía de las bandas 2s y 2p no se encuentran separadas, solapando ambas bandas. Gracias a este comportamiento no se genera una brecha energética (o *band-gap*) y existe una disponibilidad de estados vacíos accesibles para los electrones de la banda de valencia; convirtiendo así al berilio en conductor.

Si la banda de conducción estuviera llena o la brecha entre la banda de valencia y la banda de conducción fuese muy grande, el material sería aislante (como ocurre con el carbono).



Si la brecha que los separa es pequeña, los electrones pueden ser promocionados mediante un pequeño aporte energético hacia la banda de conducción, resultando en una sustancia semiconductor.

La conducción en semiconductores sólo es posible en alta temperatura o en campos eléctricos intensos, ya que se precisa que se facilite la energía de activación necesaria para que los electrones puedan pasar a la banda de conducción, saltando la banda de energías prohibidas.

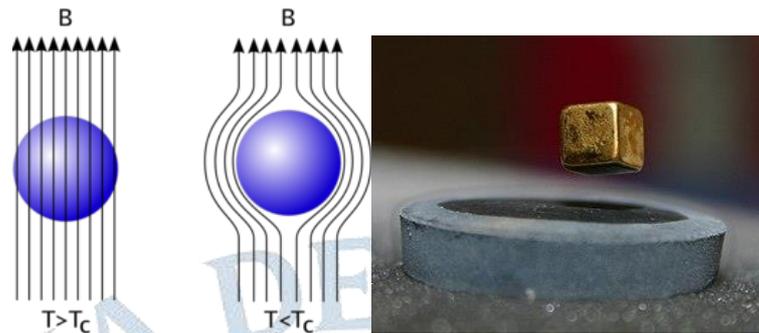
El semiconductor tiene un *band-gap* inferior a 4 eV (normalmente entorno a 1 eV), a excepción del diamante con 5,2 eV.

Algunos semiconductores conocidos y con amplias aplicaciones tecnológicas son el silicio, el germanio y el estaño alfa gris.

#### 4. SUPERCONDUCTIVIDAD.

Los superconductores son materiales cuya resistencia al paso de la corriente eléctrica es cero por debajo de cierta temperatura crítica ( $T_c$ ), convirtiéndose en un conductor perfecto.

Por debajo de esa temperatura y en presencia de un campo magnético débil, el superconductor se comporta como un diamagnético perfecto, repeliendo así al campo (expulsando el campo magnético del interior hacia el exterior). Este efecto de repulsión recibe el nombre de efecto Meissner. La expulsión del campo magnético del material superconductor da pie a efectos curiosos como la levitación de un imán sobre el material superconductor a baja temperatura.



Los campos magnéticos aplicados son capaces de destruir el carácter superconductor de un material, ya que al aumentar el campo magnético (B) externo, la temperatura crítica ( $T_c$ ) disminuye.

a. **TEORÍAS DE LA SUPERCONDUCTIVIDAD.**

La superconductividad fue observada por primera vez en el año 1911 por Kamerlingh, comprobando que el mercurio por debajo de una temperatura de 4 K anula su resistencia por completo.

Más tarde se descubrieron otros metales con el mismo comportamiento, pero con el gran factor limitante de operar con temperaturas cercanas al cero absoluto.

Actualmente se han descubierto nuevos superconductores que pueden operar en torno a 100 K.

Una propiedad característica de los superconductores es que en presencia de campos magnéticos intensos pierden su carácter superconductor.

Se pueden clasificar los superconductores según el valor crítico del campo magnético ( $H_c$ ):

- **Tipo A:** Presenta solo un valor de  $H_c$  a partir del cual pierden sus propiedades superconductoras. Se incluyen metales puros como el estaño.
- **Tipo B:** Presenta dos campos críticos  $H_{c-1}$  y  $H_{c-2}$ , de forma que a partir del segundo pierden todas las propiedades superconductoras. Aquí se incluyen las modernas aleaciones con metales de transición.

Actualmente la superconductividad se explica mediante la Teoría de los Pares de Cooper, según la cual los electrones responsables de la superconductividad circulan en grupos pares, de forma que fluyen a través de la red sin llegar a experimentar colisiones y evitando así la resistencia eléctrica. Esta teoría no es totalmente aceptada y tiene ciertos problemas.

Una más actual es la Teoría de los Magnetones, que consiste en oscilaciones de los espines de los electrones que propician unos itinerarios preferentes, que minimizan las colisiones de los electrones.

Aún así, no se conoce a día de hoy una teoría lo bastante amplia que explique de forma coherente el mundo de los superconductores.

## b. PROPIEDADES DE LOS SUPERCONDUCTORES

Entre los diferentes propiedades de los superconductores se pueden destacar las siguientes:

- A partir de una cierta temperatura crítica ( $T_C$ ) se anula por completo su resistencia al paso de corriente eléctrica.
- Para un determinado valor de un campo magnético ( $H_C$ ) los superconductores pierden su superconductividad.
- Los superconductores presentan anisotropía cristalina, conduciendo mejor la corriente eléctrica en determinadas direcciones preferentes.
- Si unimos dos superconductores por una lámina de un óxido aparecen los detectores o SQUID, que actúan a modo de conmutadores de superconductores. Los SQUID son capaces de detectar magnitudes físicas como movimiento, voltajes y campos magnéticos y tienen un uso incipiente en detectar biomagnetismo (voltaje del cerebro).

## 5. IMPORTANCIA DE LOS SEMICONDUCTORES Y SUPERCONDUCTORES EN LAS NUEVAS TECNOLOGÍAS.

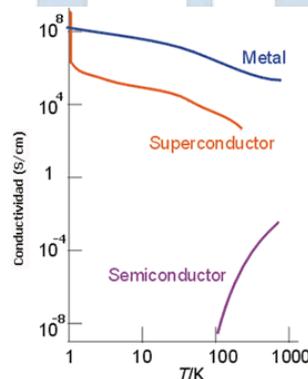
La importancia de los semiconductores y superconductores es esencial y se detallan en los siguientes apartados.

### a. APLICACIONES DE LOS SEMICONDUCTORES.

A bajas temperaturas se comporta como aislante, pero al aumentar la temperatura y debido a la proximidad entre la banda de valencia y la banda de conducción, algunos electrones abandonan la de valencia, estableciendo una corriente eléctrica cuando se aplica un campo eléctrico exterior.

Se establece una doble conducción: por un lado la correspondiente al salto hacia la banda de conducción, y por otro la que corresponde al movimiento de los huecos generados en la banda de valencia.

A la conductividad de los semiconductores se le denomina conductividad intrínseca, por ser propia del semiconductor, la cual depende de la temperatura, aumentando con la misma.



Hoy en día todo aparato electrónico posee un dispositivo semiconductor. Los semiconductores se pueden usar como reguladores de la conductividad, siendo para ello necesario el dopado.

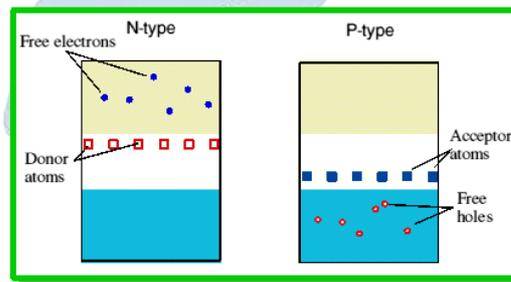
El dopado es la adición de impurezas para añadir un nuevo nivel energético situado en la zona prohibida.

Si la impureza genera el nivel próximo a la banda de valencia, la corriente se produce gracias al movimiento de huecos en el nivel de valencia (tipo P).

Si se encuentra el nivel energético próximo a la banda de conducción, la corriente se produce ahí (tipo N).

Para conseguir los semiconductores tipo P se añaden al semiconductor boro, aluminio o indio entre otros, que presentan únicamente tres electrones en su capa de valencia, de modo que se originan “huecos” que permiten la conducción.

Para formar semiconductores tipo N se añade elementos como fósforo, arsénico o antimonio, que presentan cinco electrones en su capa de valencia, los cuales son electrones libres que se incorporan fácilmente a la banda de conducción.



A la conductividad obtenida por el dopado se le denomina conductividad extrínseca.

La conductividad va a depender de la concentración volumétrica de electrones libres ( $n$ ) y de huecos ( $p$ ), de la carga del electrón ( $q$ ) y de la movilidad de los electrones ( $\mu_n$ ) y huecos ( $\mu_p$ ).

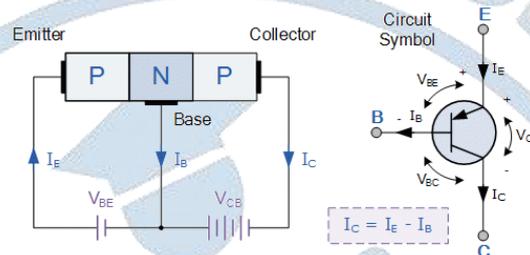
$$\sigma = \mu_n \cdot n \cdot q + \mu_p \cdot p \cdot q$$

Las aplicaciones de estos semiconductores son:

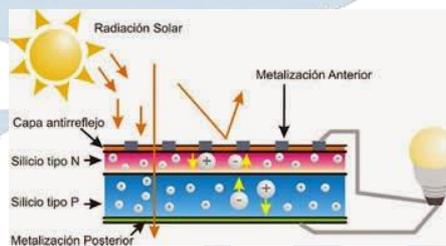
- Uniones tipo p-n o diodos: al poner en contacto un semiconductor p y uno n se produce en la superficie de contacto un intercambio instantáneo de electrones, desde n hacia p y de huecos desde la p hacia la n. Esto provoca la aparición de nuevas zonas cargadas cercanas a la superficie de separación. Se genera una diferencia de potencial en la interfase, impidiendo la redistribución de cargas. En función de cómo se polarice el diodo al conectar una fuente eléctrica externa en sus extremos, esta diferencia de potencial aumentará o disminuirá de forma que

conseguiremos que la corriente eléctrica solo se transmita en un solo sentido. Los diodos se usan como rectificadores de la corriente alterna.

- Uniones tipo pnp, npn o transistor: Tres semiconductores en contacto y en los órdenes p-n-p ó n-p-n. Los elementos de los extremos reciben el nombre de emisor y colector, mientras que el central es la base, siendo esta muy delgada (0,01 mm). Son capaces de amplificar señales eléctricas o bloquearlas, ya que un pequeño cambio de intensidad de corriente en la base provoca un gran cambio en la intensidad de corriente del colector. Se desarrolló a mediados del siglo XX (1949).



- Circuitos integrados: conjunto de transistores, diodos, resistencias y condensadores interconectados sobre un soporte de silicio. Son esenciales para el funcionamiento de cualquier dispositivo electrónico. Los circuitos a lo largo de la historia han ido siguiendo la ley de Moore, que predecía que cada 2 años se duplica el número de transistores en un circuito integrado, permitiendo tener más capacidad de procesamiento en un menor espacio.
- Células solares: uniones p-n en las que la promoción electrónica a la banda de conducción puede hacerse gracias a la luz solar. Al incidir fotones sobre el semiconductor p se originan electrones libres. Algunos emigran a la unión donde son acelerados de la zona n, creando un exceso de carga positiva en p y negativa en n. Aparece una diferencia de potencial de forma que si se conecta un cable ambos semiconductores por los extremos aparece una corriente eléctrica.



- LEDs: son diodos capaces de emitir fotones al pasar una corriente eléctrica a través de la unión p-n. Se usan en relojes digitales, calculadoras, aparatos de vídeo, etc.
- Fotoconductores: son semiconductores capaces de conducir la corriente eléctrica al ser iluminados. El selenio es usado para fotocopiadoras.

## b. APLICACIONES DE LOS SUPERCONDUCTORES.

Presentan una resistividad muy próxima a cero para una temperatura determinada. Algunas aplicaciones son las siguientes:

- Producción de grandes campos magnéticos: Es la aplicación más importante. Es empleada en laboratorios de física con fines de investigación y es común ver pequeños electroimanes superconductores que sirven para producir campos magnéticos de alta intensidad. También se utilizan los electroimanes superconductores para generar campos magnéticos altamente estables. Útiles en los estudios de resonancia magnética nuclear (RMN) y microscopía electrónica de alta resolución (STEMHR). Son muy utilizados en las cámaras de burbujas que sirven para detectar partículas. Algunas de las aplicaciones más importantes de los electroimanes superconductores son biológicas, químicas, médicas, levitación, generación y almacenamiento de energía, separación magnética, limpieza de aguas contaminadas, blindaje y modelaje de campos magnéticos, aceleradores de mucha energía (LHC), etc.
- Fabricación de componentes electrónicos: Uso de la transición de estado normal a estado superconductor (interruptor), pero se abandonó este uso. Efecto Josephson → paso de corrientes superconductoras a través de una unión  $S/I/S$  (superconductor – aislante – superconductor), normalmente no debería dejar pasar ningún electrón, siendo este un fenómeno típicamente cuántico. El SQUID (dispositivo superconductor de interferencia cuántica) es uno de los dispositivos superconductores más usados. Son los instrumentos más sensibles que existen para medir una gran variedad de cantidades físicas como campos magnéticos, voltajes muy pequeños, biomagnetismo (para detectar las fuentes de los pequeños campos magnéticos generados por el cerebro), etc. Existen ordenadores con muchos elementos superconductores y que son mucho más rápidos que los contruidos con materiales normales. Son usados por los departamentos de defensa para procesar la información de los satélites.
- Tren de levitación magnética: Los trenes de levitación magnética basados en superconductores aprovechan el fenómeno de la exclusión magnética o efecto Meissner, por el cual un superconductor expulsa las líneas de flujo magnético de su interior al alcanzar la temperatura crítica. Esto permite la creación de fuerzas de repulsión estables entre los imanes de las vías y los superconductores situados en el tren, produciendo la levitación sin necesidad de un consumo energético continuo para mantener el campo. Además, la ausencia de resistencia eléctrica en los materiales superconductores permite la circulación de corrientes intensas sin pérdidas por efecto Joule, lo que resulta fundamental para sostener campos magnéticos de gran intensidad y estabilidad, garantizando un desplazamiento a altas velocidades con mínima fricción mecánica y alta eficiencia energética.

- Cables superconductores: Transportar energía a grandes distancias, minimizando la resistencia gracias al Efecto Joule.

$$E = I^2 \cdot R$$

Tienen que tener un gran sistema refrigerante para mantener la temperatura baja y actualmente no son viables por su alto coste.

No obstante, hay que tener en cuenta que la tecnología de los superconductores es aún incipiente y sus posibilidades reales están aún por definir.

### III. CONCLUSIÓN

Los metales han sido importantes a lo largo de la historia y sus aplicaciones han ido de la mano con el avance tecnológico.

Con la aparición de las modernas teorías del enlace metálico y la preparación de nuevos materiales con características futuristas, hacen de los superconductores y semiconductores unos tipos de materiales candidatos a cambiar nuestra realidad tecnológica.

### IV. BIBLIOGRAFÍA

- “La ciencia de los alumnos” Hierrezuelo y Montero. Editorial Elzevir.
- “La enseñanza de las Ciencias en la Educación Secundaria” Gil D. y otros. Horsori Editorial.
- “Breve historia de la ciencia” Isaac Asimov.
- “Química general” R. Petrucci. Pearson.
- “Principios básicos de Química” H.B.Gray. Editorial Reverté.
- “Química Inorgánica Básica” Cotton y Wilkinson. Editorial Limusa Willey.
- “Química Inorgánica Avanzada” Cotton y Wilkinson. Editorial Limusa Willey.
- “Electronic Properties of Materials” Rolf E. Hummel. Springer

ONUBA. ©