

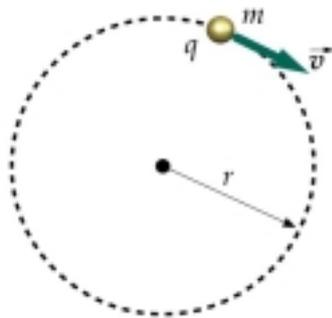
## TEMA 20. ESTRUCTURA DE LA MATERIA.

### 1. Momentos magnéticos atómicos.

Hemos visto en el primer cuatrimestre, el diferente comportamiento de las sustancias al ser introducidas en un campo magnético, lo que nos ha permitido clasificarlas en **dia-**, **para-** y **ferromagnéticas**. El origen de la imantación de las sustancias se encuentra en la orientación que **experimentan los momentos magnéticos de los átomos**, al ser introducidos en campos magnéticos.

El **momento magnético orbital atómico**, puede ser deducido usando el modelo de Bohr (semiclásico), aunque su origen es claramente cuántico.

Sea un electrón con masa  $m$  y carga  $q$ , con velocidad  $v$ , siguiendo una órbita circular de Bohr, de radio  $r$ , como se ve en la **figura 29.32**.



**Figura 29.32.** Una partícula de masa  $m$  y carga  $q$ , girando alrededor de un núcleo se comporta como una espira magnética, de área  $\pi r^2$  e intensidad  $q/T$ , donde  $T$  es el período de las revoluciones.

Su momento angular orbital vale:

$$L = mvr = \ell \hbar, \ell = 0, 1, 2, \dots$$

Clásicamente, el momento magnético de la espira es  $\vec{\mu} = I\vec{A}$ , producto del área por la intensidad de corriente. La intensidad es la carga por unidad de tiempo  $I = q/T$ . Así pues, el momento magnético  $\mu$  que debe asociarse al electrón por su movimiento orbital vale:

$$\mu = IA = \frac{q}{T}(\pi r^2) = \frac{qv}{2\pi r}(\pi r^2) = \frac{1}{2} qvr \rightarrow \mu = \frac{q}{2m} L$$

Introduciendo el valor del momento angular predicho por Bohr:

$$\mu = -\frac{e\hbar}{2m} \ell = -\mu_B \ell, \text{ con } \ell = 0, 1, 2, \dots$$

donde se ha considerado que la carga del electrón es negativa, y hemos introducido el factor  $\mu_B$  denominado **magnetón de Bohr**, que relaciona el número cuántico orbital con el momento magnético (orbital) del electrón.

### Comentarios:

- La existencia del momento angular implica la existencia de momento dipolar magnético, y como aquel se encuentra cuantizado, los valores del momento magnético de los átomos también lo estarán.
- La relación anterior, entre el momento magnético y el momento angular es correcta incluso para los momentos magnéticos dipolares originados por el movimiento orbital ( $\ell$ ) de los electrones, a pesar de haber sido obtenidas clásicamente. Para el caso del momento angular intrínseco o espín ( $s$ ), que será introducido en la próxima sección, la relación correcta que da la M.C. es  $2\mu_B$ .

## 2. El espín de los electrones.

Hemos visto en el primer cuatrimestre y recordado ahora, que una espira conductora origina un momento dipolar magnético. De la misma forma, los electrones en los átomos, al disponer de momento angular, se comportan “*como espiras elementales*”, con momento dipolar magnético. La energía de un dipolo en el interior de un campo viene dada por:

$$U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$$

Como hemos visto en el tema anterior, las *proyecciones* del momento angular  $L$  sobre el eje del campo magnético (eje  $z$ ), están cuantizadas (ver *figura 37.6*), de manera que cada una de estas orientaciones para un mismo valor de  $\ell$ , por la expresión anterior, tendrá diferente energía. En consecuencia, si ponemos átomos de hidrógeno en un campo magnético exterior, el primer estado excitado, con tres proyecciones posibles  $\ell$ , se deberá dividir en tres diferentes niveles de energía. Esto puede detectarse mediante un experimento con relativa precisión, que estudia las radiaciones emitidas cuando el átomo se desexcita al estado fundamental.

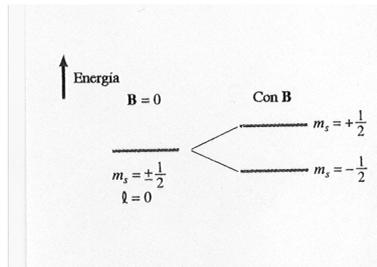
En consecuencia, los estados con  $\ell=0$ , no se dividen, los de  $\ell=1$ , se dividirán en tres subniveles,  $\ell=2$  en 5 etc. Estas subdivisiones reciben el nombre de **multipletes** en la terminología de los físicos que estudiaron la espectroscopía atómica. **No esperamos pues, más que multipletes impares.**

**Sin embargo, se observaron dobletes y multipletes pares.**

El problema se resolvió con la introducción del momento angular intrínseco del electrón o espín. (Imagen de la Tierra alrededor del Sol y su rotación diaria). El momento angular intrínseco del electrón toma el valor

de  $(1/2)\hbar$ : así que **el número cuántico de espín  $s=(1/2)$** . El espín es una propiedad **intrínseca** del electrón.

De la misma manera que el momento angular orbital aparece con una multiplicidad de  $(2\ell+1)$ , correspondiente a las diferentes proyecciones sobre el eje z, el momento intrínseco de espín dispone también de  $(2s + 1)$  estados, es decir, 2 estados denominados **up y down**. En ausencia de un campo magnético la energía de estos dos estados es idéntica, siendo ligeramente diferente con su presencia. (figura 42.13).



**Figura 42.13.** Subdivisión de niveles para estados con  $\ell = 0$ , originado por el espín atómico. Esto explica la existencia observada de multipletes pares.

Con la introducción del espín del electrón, el número de estados posibles del electrón para una determinada  $\ell$  se duplica, pasando a valer  $2(2\ell+1)$ .

Razonar los estados para diferentes valores de  $\ell$ .

En la terminología habitual atómica se denominan **ondas s, p, d, f, g, etc.** respectivamente, las que corresponden a valores de  **$\ell = 0, 1, 2, 3, 4$  etc.**

### 3. El principio de exclusión y átomos multielectrónicos.

Podemos **conceptualmente**, hacer extensible el modelo de Bohr a átomos con múltiples electrones, considerando diferentes órbitas posibles y los electrones distribuyéndose en ellas. Cada electrón se moverá sometido a la atracción coulombiana del núcleo ( $Ze$ ), y a la repulsión del resto de electrones.

A pesar de la complejidad del cálculo mecanocuántico, y la dificultad que se origina al tratar un número elevado de cuerpos, las simetrías del problema conducen a que para los átomos con múltiples electrones, **el número cuántico principal  $n$ , y el número orbital  $\ell$  continúan siendo válidos.** Ahora bien, se rompe "*la degeneración en  $\ell$* ", es decir, estados de  $\ell$  diferente con el mismo número principal  $n$ , tienen ahora diferente energía.

Cabe esperar que el estado fundamental de cada átomo se obtuviera con los electrones ocupando la órbita de energía mínima. Esto conduciría a

que los espectros de todos los átomos serían semejantes al del hidrógeno, contrariamente a la rica variedad de espectros atómicos observados.

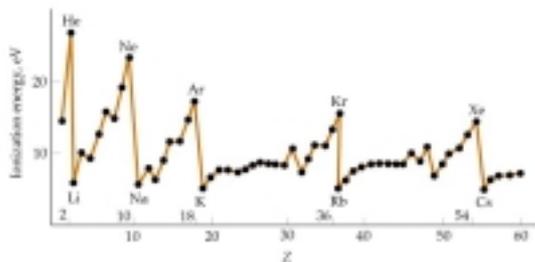
Pauli resolvió el problema introduciendo el **principio de exclusión**:

Cada uno de los estados cuánticos diferentes puede albergar solamente **dos electrones**, uno con estado de espín *up* y el otro con el estado *down*.

Usando el principio de exclusión podemos ir obteniendo las configuraciones de los electrones de los diferentes átomos en su estado fundamental, como se observa en la **figura 42.16**, llenando en primer lugar los niveles disponibles de energía más baja (**figura 42.16**)

- **Concepto** de capa completa, **electroafinidad** de halógenos y alcalinos.

El efecto de la distribución de los electrones en capas es visible en muchos parámetros físicos y químicos de los átomos, como por ejemplo, el **potencial de ionización**, o energía mínima que hay que suministrar al átomo para arrancarle un electrón ligado. **La figura 37.17** muestra sin ambigüedad el concepto de capa completa.



**Figura 37.17.** Potencial de ionización. Los elementos con capas completas exigen un valor muy elevado de energía para ser ionizados, al contrario que los metales alcalinos, con un solo electrón fuera de la capa completa.

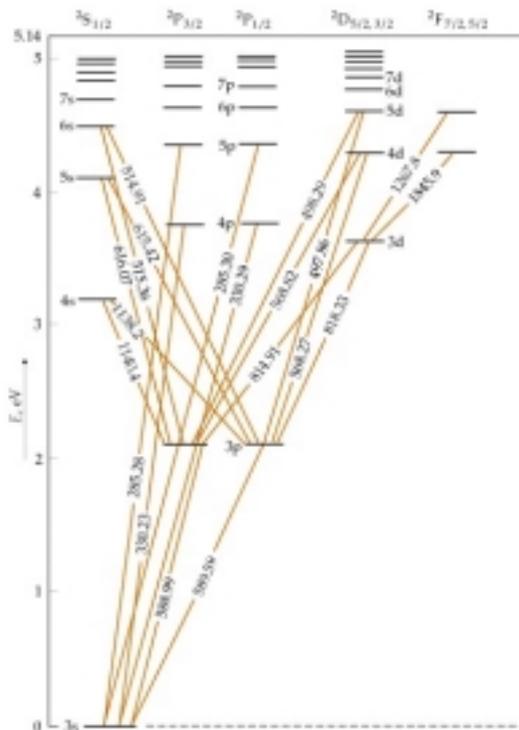
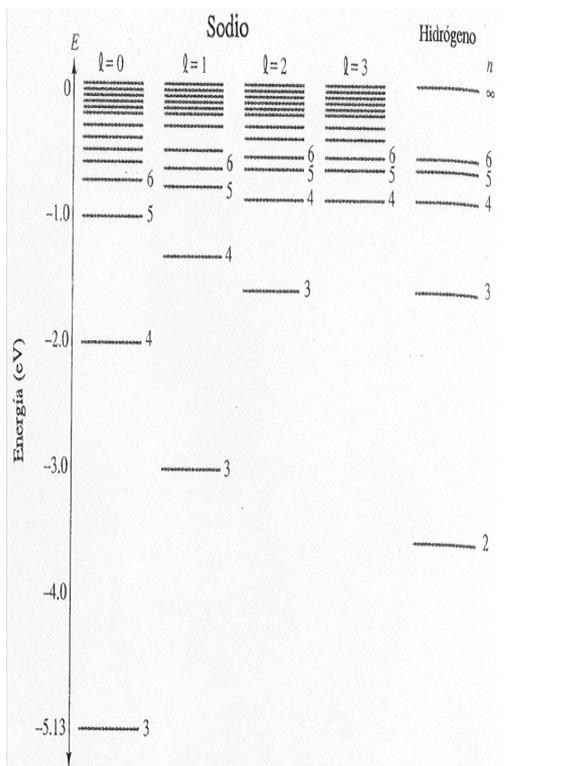
### 3.1. Validez del principio de exclusión.

El principio de exclusión de Pauli únicamente se aplica a las partículas de espín semientero, como los electrones, protones y neutrones, que reciben el nombre de **fermiones**. Como consecuencia, también en los núcleos se observa un modelo de distribución de los protones y neutrones **en capas**, como en los átomos, si bien es otra interacción básica la que se aplica: **la interacción fuerte**.

Las partículas que tienen un valor entero de su momento angular intrínseco de espín,  $s\hbar$ , con  $s = 0, 1, 2, \dots$ , reciben el nombre de **bosones**, y no cumplen el principio de exclusión. Por el contrario, estas partículas en la naturaleza tienden a tener el mismo estado. Un ejemplo es el fotón, ya introducido.

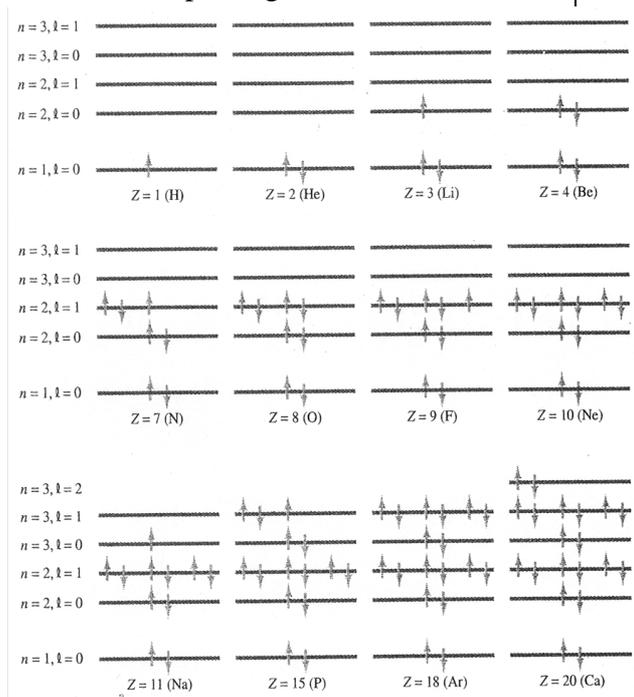
**Los fotones**, como todas las partículas con **espín intrínseco entero**, muestran su preferencia para **agruparse con el mismo estado cuántico**.

Esta tendencia es importante para explicar el comportamiento del  $^4\text{He}$  líquido y del láser



**Figura 42.14.** Niveles de energía del átomo de sodio (Na), cuantitativamente similar al átomo de hidrógeno. Se observa que los multipletes tienen energías similares, aunque diferentes. Los niveles de la misma  $n$  y  $l$  diferente, se separan en energía debido al campo magnético externo.

**Figura 37.18.** Diagrama del Na, con las transiciones permitidas y la terminología en ondas s,p,d,f etc.



**Figura 42.16.** Esquema de ocupación de niveles de energía para los átomos ligeros.

#### 4. Interacción espín – órbita y estructura fina.

En general, un electrón en un átomo posee **simultáneamente** momento angular orbital, caracterizado por su número cuántico  $\ell$  y momento angular de espín caracterizado por el número cuántico  $s$ . **Ejemplos clásicos** semejantes son el giróscopo y la Tierra, que poseen simultáneamente momento angular de precesión (rotación alrededor del Sol) y momento angular “de espín”. El **momento angular total**  $\vec{J}$  es la suma de ambas contribuciones, de manera que:

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

En mecánica clásica el momento angular total de los sistemas de **fuerzas centrales** es una magnitud que se conserva, y puede tomar cualquiera de los valores comprendidos entre  $L+S$  y  $L-S$ .

En mecánica cuántica, el momento angular del sistema también se conserva, lo que conduce a que los estados estacionarios han de estar definidos por su momento angular total  $J$ , es decir,  $J$  sirve para caracterizar los estados estacionarios de los átomos. Por otra parte, el momento angular total  $J$ , así como el orbital  $L$  y el intrínseco o de espín  $S$  **se hallan cuantizados**.

Una regla importante en la configuración atómica es **que las capas completas se acoplan a momento angular total  $J=0$** , es decir solamente contribuyen al momento angular de los estados estacionarios de los átomos los electrones en capas incompletas. Sea pues por sencillez un átomo con un solo electrón en la capa exterior, caracterizado por su valor orbital  $\ell$  y momento intrínseco de espín  $s$ . El momento angular total puede tomar los valores:

$$j = \ell + s \quad \text{o también} \quad j = \ell - s$$

##### 4.1 Estructura fina.

Los estados con igual valor de  $\ell$  y  $s$ , pero con diferente valor de  $j$ , difieren ligeramente en su energía debido, a la **interacción espín – órbita**, y este desdoblamiento de las líneas espectrales recibe el nombre tradicional **de estructura fina**. Así, un electrón con  $n=2$ ,  $\ell=1$  y  $s=1/2$ , podrá tener  $j=3/2$ , o  $j=1/2$ , estados que se suelen representar por las letras  **$2P_{3/2}$ , y  $2P_{1/2}$**  con el momento angular  $j$  como subíndice. La interacción espín –órbita origina que estos dos estados tengan energía ligeramente diferente, como se observa en la **figura 37.15**.

De forma cualitativa se puede comprender el origen de la interacción espín – órbita, con una imagen simplista dada por el modelo de Bohr

(figura 37.14 b). Sea el sistema de referencia del electrón: al girar el núcleo a su alrededor le genera un campo magnético, como se ve en la figura. B y L son paralelos. Por la existencia del espín, el electrón tiene un momento magnético dipolar intrínseco  $\mu_s$ , cuya energía potencial es  $U = -\vec{\mu}_s \cdot \vec{B}$ . En consecuencia, el estado de energía más baja es el que corresponde al momento magnético  $\mu_s$  paralelo a B. Como el electrón tiene carga negativa, esto sucede cuando el **espín s es antiparalelo al momento angular orbital L**  $\Rightarrow$  son estados de energía más baja, en el modelo de capas atómico, los que tienen momento angular total J menor.

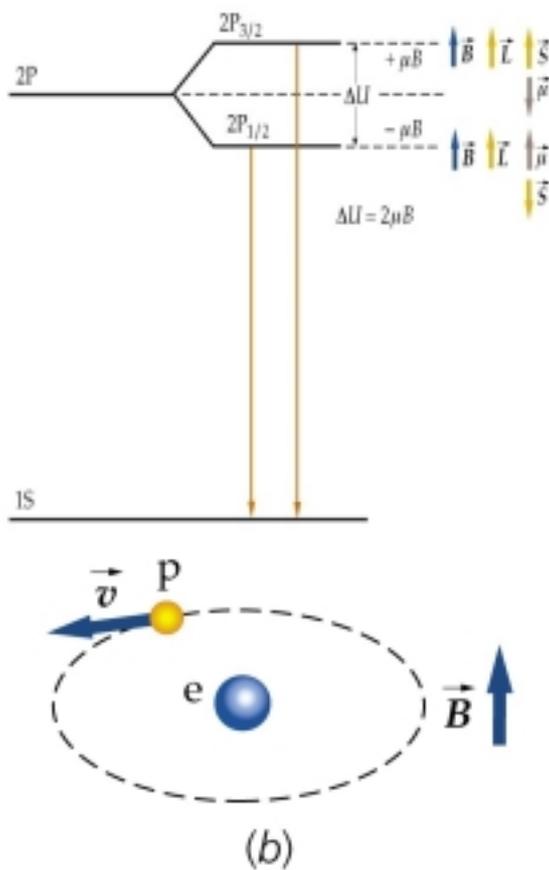


Figura 37.15. Diagrama del desdoblamiento energético de los niveles atómicos por estructura fina. La interacción espín-órbita subdivide el nivel 2P, en dos estados de energía próxima y con el estado de  $j=3/2$  con energía superior

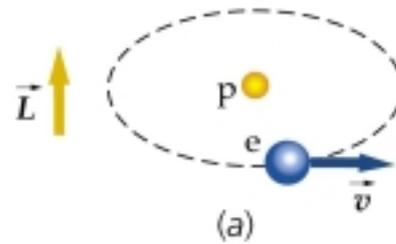


Figura 37.14. b) En el sistema de referencia del electrón, el núcleo por su movimiento le genera un campo magnético B que interactúa con su momento magnético intrínseco, originado por el espín.

## 5. Estructura molecular.

Las moléculas son **combinaciones de dos o más átomos**. En consecuencia están constituidas por un número relativamente grande de elementos y en su estudio, aunque se aplica la M.C., es necesario tratarlas mediante ciertas aproximaciones. La primera es que los núcleos (muy masivos) están quietos, y son los electrones los que se desplazan alrededor de los núcleos con mucha velocidad, creando de hecho una distribución de carga negativa que rodea los núcleos.

**Las moléculas se forman** porque las fuerzas de atracción entre los electrones y los núcleos, son superiores a las fuerzas repulsivas de los electrones entre sí, sumadas por su parte con las fuerzas repulsivas de los núcleos, originándose en la molécula una situación de **equilibrio estable**.

Existen unas ciertas condiciones previas para que la formación de las moléculas sea posible:

- Los átomos que se unen deben tener electrones fuera de capas completas, que puedan unirse entre ellos y emparejarse con sus espines opuestos. Esta **configuración de espines opuestos** es muy **estable**, debido a la atracción que experimentan los electrones, cada uno de ellos con otro **núcleo acompañante**. Los electrones emparejados de esta forma, **constituyen un enlace**, es decir, son el mecanismo que sirve para unir los átomos.
- Solamente los electrones fuera de las capas completas pueden formar enlaces. Esto ocurre porque los electrones en capas cerradas ya tienen su *partenaire* y una configuración muy estable, difícilmente quebrantable. El punto importante es que, obviamente las **propiedades químicas de los elementos sólo pueden depender de los electrones en la capa externa**: → clasificación de los elementos por grupos en la tabla Periódica.
- Cuando hay diferentes electrones en una capa incompleta, pueden emparejarse entre ellos mismos, o entre otros procedentes de otros átomos. Esta es una cuestión de estabilidad en la que se adopta siempre la configuración de menor energía, la más estable.

#### 4.1 Enlace covalente.

Cuando los electrones que constituyen el enlace están compartidos entre los dos átomos decimos que el enlace formado es **covalente**. Esto ocurre por ejemplo en la molécula de H<sub>2</sub>. La disminución de energía, que nos da una configuración más estable para la molécula que para los átomos separados, es un efecto cuántico, originado al **compartir los dos electrones emparejados**. **Siempre que dos átomos idénticos se unen, el enlace es covalente**.

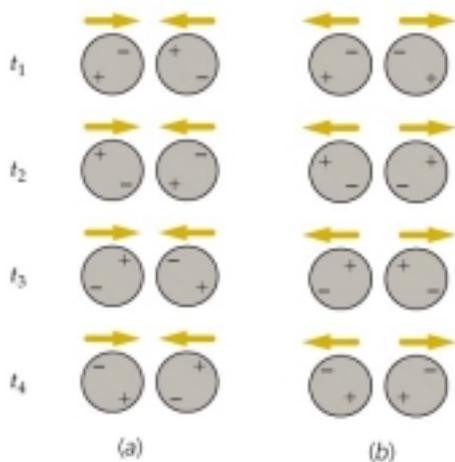
Los elementos nobles, como disponen de capas atómicas completas y con los electrones emparejados, no se unen para formar moléculas mediante enlaces covalentes. Sin embargo, pueden unirse los átomos en configuraciones de dos, mediante las **fuerzas de Van der Waals**, que son las fuerzas residuales coulombianas que existen entre configuraciones de carga neutra.

## 4.2 Enlace iónico.

Si uno de los átomos que forma el enlace, tiene una gran avidez (**electroafinidad**) de electrones, (como los átomos de la familia de los *halógenos*, puesto que les falta uno para tener capa completa), y se une con un *elemento alcalino*, (que dispone de un electrón en la capa incompleta y poco ligado, ver **figura 31.17**), hay en la configuración suficiente energía para que el electrón sea arrancado del átomo alcalino y transferido al átomo halógeno (ejemplo F1Li). Se han formado así **dos iones**, uno positivo y otro negativo, que se atraen por la interacción de Coulomb entre sí, constituyendo **un enlace iónico**.

## 4.3 Fuerzas de Van der Waals.

Dos moléculas de cualquier tipo, se atraen una a la otra por fuerzas electrostáticas denominadas **fuerzas de Van der Waals**. Dado que las moléculas son neutras, se trata de fuerzas que podemos denominar *residuales*, y que se originan en realidad mediante dipolos eléctricos inducidos, de una molécula a otra. Estas fuerzas pueden, incluso originar enlaces, aunque más débiles que las anteriores.



**Figura 38.6.** Fuerzas de Van der Waals sobre moléculas apolares. En a) se ven las configuraciones instantáneas atractivas, mientras que en b) las configuraciones repulsivas. Ahora bien, una molécula con momento dipolar **tiende a polarizar** la molécula próxima, por lo que las **configuraciones atractivas son más probables que las repulsivas**.

Las **fuerzas de Van der Waals son las responsables de los agregados materiales**, como los líquidos y los sólidos. A temperatura elevada estas fuerzas no pueden superar la agitación térmica de los átomos y moléculas, de manera que las sustancias son gases. A temperaturas bajas, la agitación térmica es despreciable y las sustancias condensan en líquidos y sólidos. La explicación consiste en los momentos dipolares eléctricos instantáneos que aparecen en las moléculas, aunque estas sean polares (**figura 38.6**).

## 5. Espectros moleculares.

Cabe esperar que, dado que las moléculas confinan las partículas en espacios del tamaño del átomo, los niveles de energía moleculares fueran del mismo orden de magnitud que los de los átomos, entre 1 y 10 eV.

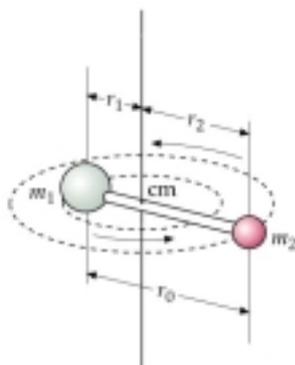
Ahora bien, las distancias entre los núcleos que conforman las moléculas están definidas: en mecánica clásica se permiten vibraciones alrededor del punto de equilibrio. Además, las moléculas pueden efectuar rotaciones globales. Pues bien, los estudios espectrales conducen a una estructura mucho más compleja de los niveles moleculares que la puramente semejante a la atómica, enriquecida por un espectro de vibración de los núcleos alrededor de su punto de equilibrio, y un espectro de rotación global de las moléculas.

Así, los niveles de energía de las moléculas se pueden separar en tres contribuciones diferenciadas: electrónica, producida por la excitación de los electrones en la molécula, vibratoria, originada por las oscilaciones de los átomos en la molécula, y rotacional, por las diferentes rotaciones de la molécula alrededor de su centro de masa.

### 5.1 Espectro rotacional.

Consideremos una molécula diatómica, como en la **figura 38.12**. La energía cinética de rotación se puede escribir en función del momento angular, y éste está cuantizado. Así:

$$E = \frac{1}{2} I \omega^2 = \frac{L^2}{2I} = \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2I} = \ell(\ell+1)E_{o,rot}$$



**Figura 38.12.** Molécula diatómica que gira alrededor de su centro de masa.

La energía rotacional característica de una molécula viene dada por el valor:

$$E_{o,rot} = \frac{\hbar^2}{2I}$$

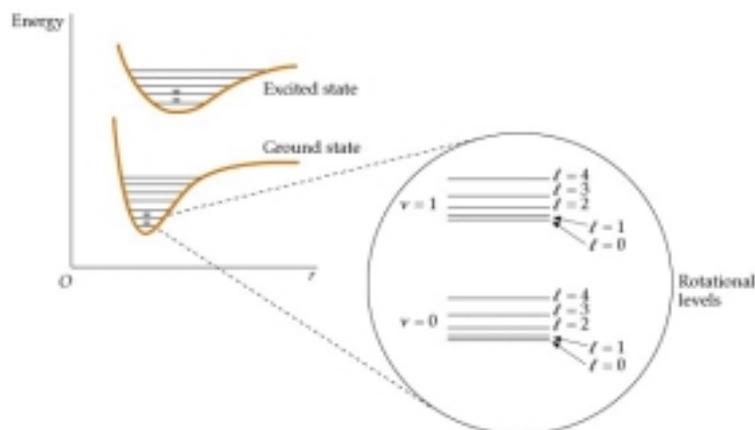
y, dados los valores de los momentos de inercia de las moléculas, la separación entre los niveles rotacionales es del orden de  $10^{-3}$  eV.

## 5.2 Espectro vibracional.

Se puede demostrar en M.C., al resolver la ecuación de Schroedinger, que el **oscilador armónico elemental** presenta niveles de energía **uniformemente espaciados**, con los siguientes valores:

$$E_{\text{vib}} = \left( v + \frac{1}{2} \right) hf, \text{ amb } v = 0, 1, 2, 3, \dots$$

donde el valor de  $\frac{1}{2}$  se puede explicar por el principio de incertidumbre,  $f$  es la **frecuencia natural** del oscilador y  $v$  representa **el número cuántico** del estado de vibración de la molécula.



**Figura 38.13.** Niveles energéticos de una **molécula diatómica**: deben verse los niveles electrónicos, los vibracionales y los rotacionales (en ampliación).

Es pues el valor de la frecuencia propia de las moléculas lo que nos da idea de la separación de los niveles vibracionales. Estas resultan ser del orden de  $10^{15}$  Hz, por lo que la separación típica de los niveles vibracionales es del orden de 0.1 eV. La **figura 38.13** presenta esquemáticamente niveles energéticos electrónicos, vibracionales y rotacionales.

## 6. Teoría de bandas.

Cuando reunimos átomos idénticos en la formación de una estructura sólida o red cristalina, desarrollamos un **agregado de átomos idénticos**. En la red cristalina, en la que los núcleos ocupan posiciones definidas de figuras geométricas, cada átomo interactúa con el resto de átomos, y ya no podemos considerar la estructura como una **mera superposición de átomos individuales** con sus niveles atómicos inalterados.

En efecto, el **principio de exclusión de Pauli**, **prohíbe explícitamente** que dos electrones (fermiones) ocupen el mismo estado cuántico: así, los

átomos que separados son idénticos, al pasar a interactuar a través de la formación de la red, **modifican sus niveles**, para verificar el principio de exclusión. El resultado es la **formación de bandas de energía**. Obsérvese que la separación de los niveles viene originada por la interacción adicional que supone la proximidad de los átomos, con sus electrones y núcleos interactuando conjuntamente.

### 6.1 Formación de bandas.

Consideremos una red muy elemental, constituida **por dos átomos idénticos**, por ejemplo de hidrógeno.

Los niveles de energía para cada átomo, antes de la interacción son  $E_1 = -13.6 \text{ eV}$ , y  $E_2 = -13.6/2^2 = -3.4 \text{ eV}$ , que como se ve se encuentran separados una considerable distancia (de 10.2 eV). Cuando los átomos están muy alejados, no hay restricciones sobre sus niveles de energía, de manera que los átomos en el estado fundamental son idénticos. Decimos que sus niveles energéticos están **degenerados**, pues los dos electrones ocupan niveles con la misma energía: como los espines pueden ser *up* y *down*, tenemos cuatro estados degenerados en energía.

Si aproximamos ahora los dos átomos, los niveles energéticos cambian, por la presencia del otro átomo y la nueva interacción adicional – aunque pequeña-, desdoblándose el nivel inicial en dos niveles de energía próxima y que corresponden al sistema constituido por los dos átomos. A medida que vamos añadiendo átomos en la red, el número de subdivisiones va aumentando, para formar prácticamente **una banda de niveles de energía** ocupables por los electrones, cuando consideramos sólidos reales en los que el número  $N$  de átomos que forman la red puede ser del orden de  $10^{23}$ . (Figura 27.10).

En general podemos afirmar que **cuando hay niveles de energía degenerados, y una nueva interacción entra en juego, los niveles se dividen, de manera que algunos aumentan la energía y otros bajan, con relación a sus posiciones originales.**

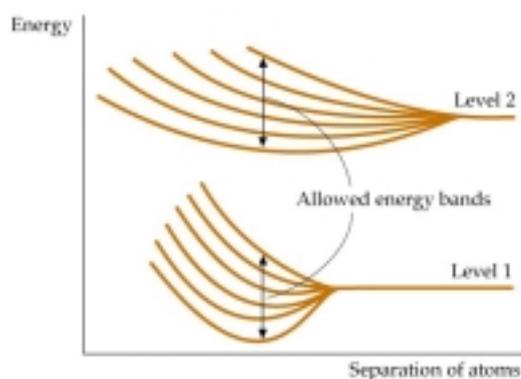


Figura 27.10. División de dos niveles de energía para seis átomos que constituyen una red, en función (eje x) de la separación entre los átomos. A medida que aumenta el número de átomos, la separación entre los niveles se hace más estrecha.

Cada nivel de energía original en el átomo aislado constituirá una banda, de manera que según sea el átomo, las bandas pueden estar alejadas en energía ( $>5$  eV), próxima ( $< \approx 1$  eV) e incluso superpuestas entre sí.

Las bandas que se originan por las capas electrónicas completas, están también totalmente ocupadas por los electrones ligados a los átomos, y no juegan ningún papel en las propiedades químicas ni conductoras del sólido. La banda de energía más alta, que contiene electrones, recibe el nombre **de banda de valencia**, pudiendo estar total o parcialmente ocupada. Se denomina **banda de conducción**, a la banda energética más baja en la que existen estados no ocupados. Recibe el nombre **de intervalo energético prohibido**, la separación de energía entre bandas, sin niveles de energía, y que no puede ser ocupada por los electrones.

## 6.2 Conductores, aislantes y semiconductores.

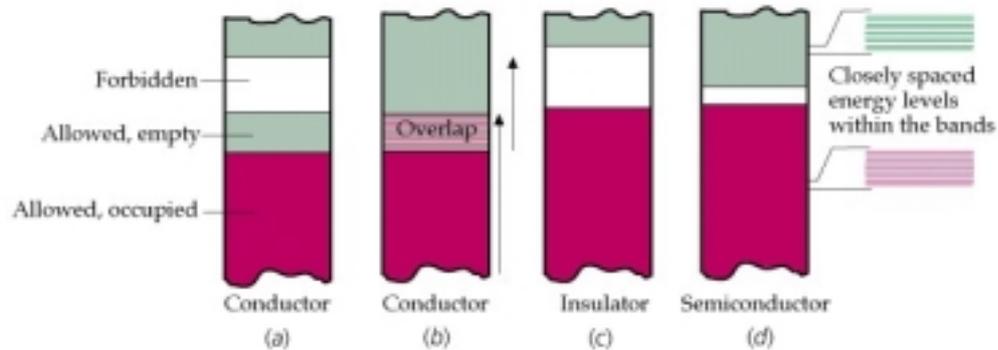
Ahora ya podemos comprender la existencia de conductores, aislantes y semiconductores.

Cuando la **banda de valencia está parcialmente ocupada**, los electrones pueden acceder con mucha facilidad cualquiera de los niveles libres de la banda, y desplazarse al interior del sólido con un débil campo eléctrico. **El sólido será conductor**. Lo mismo ocurre cuando la banda de valencia está totalmente ocupada, pero **la banda de conducción se superpone a la banda de valencia**: habrá un gran número de niveles libres para ser ocupados por los electrones en que podrán desplazarse libremente.

Consideremos por ejemplo el caso de **Na** con una configuración electrónica:  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$  y el **Mg**  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$ , que difieren en un electrón. Si unimos un número  $N$  grande de átomos de Na en una red, aparece una **interacción adicional** por la presencia de otros átomos. Como consecuencia, los  $2N$  estados degenerados de la onda  $3s$ , cuando los átomos se encuentran alejados, **romperán su degeneración** desdoblándose en niveles de energía próximos, unos hacia arriba y otros hacia abajo, pero próximos entre sí, ya que la interacción adicional es pequeña. Como en esta banda caben  $2N$  electrones, y solo hay  $N$ , la mitad de la banda se encuentra desocupada y es fácil el desplazamiento de los electrones por los niveles desocupados, con un pequeño campo eléctrico: tendremos una **estructura conductora** en la que la banda de conducción y valencia coinciden.

En el caso del Mg, los  $2N$  estados se encuentran completamente ocupados por los dos electrones del nivel  $3s$ . Ahora bien, el estado atómico  **$3p$  está muy cerca en energía del estado  $3s$** , por lo que la banda (de conducción) que se origina por este nivel, se superpone con la banda de valencia. Es suficiente un campo eléctrico débil para que los electrones

ocupen los niveles vacíos de la banda y en consecuencia el elemento sea también **conductor**.



**Figura 27.11.** Diferentes estructuras de bandas en sólidos que explican la existencia de conductores a) y b), aislantes c) y semiconductores d).

La **figura 27.11a**, representa el caso de un **conductor típico** como el Cu o el Na. La **figura 27.11b** representa el caso del Mg, un conductor con su capa de valencia completamente ocupada, pero que se superpone con la banda de conducción.

La **figura 27.11c** representa un **aislante**: la separación entre las bandas es del orden o superior a 5 eV, y la energía térmica (a  $T = 300\text{K}$ ) es muy pequeña para excitar a los electrones y que pasen a ocupar niveles de la banda de conducción. Los campos eléctricos habituales no suministran tampoco la energía necesaria: se trata pues de un aislante.

La **figura 27.11d** representa un **semiconductor intrínseco**. La separación entre bandas es tan sólo del orden de 1 eV (para el Si es de 1.2 eV y para el Ge de 0.75 eV). A muy bajas temperaturas, la agitación térmica de los electrones no es suficiente para que algunos de ellos ocupen la banda de conducción. Ahora bien, **a temperatura ambiente**, hay un número considerable de electrones en la banda de conducción, lo que origina también el mismo número de estados vacíos en la banda de valencia. Tanto los electrones en la banda de conducción, como los huecos en la de valencia contribuyen a la conducción.