

Bandas de energía, origen y consecuencias



I. Rojas^{1,2}, César Mora¹ y H. J. Herrera Suárez^{1,3}

¹CICATA-IPN Av. Legaría No. 694. Col. Irrigación, CP 11,500, México D. F.

²Universidad Tecnológica de Querétaro, Ave. Pie de la Cuesta S7N, Col. San Pedrito Peñuelas, Querétaro Qro., México.

³Universidad de Ibagué – Coruniversitaria, Carrera 22, Calle 67, Barrio Ambalá, Colombia.

E-mail: cmoral@ipn.mx

(Recibido el 6 de Julio de 2007; aceptado el 10 de Agosto de 2007)

Resumen

En un material cristalino existen bandas de energía donde los electrones se mueven libremente, es decir, estas bandas son el resultado de la superposición de los niveles atómicos de los átomos que constituyen un cristal. Cuando los átomos individuales se acercan para formar el cristal, se colocan en un arreglo periódico formando una red cristalina, donde sus niveles de energía atómicos interactúan entre sí, dando lugar a bandas de energía. Una ilustración simple de los orígenes atómicos de algunos anchos de banda de energía prohibida (*band gaps*) se dan con un ejemplo de una cadena lineal de átomos en los cuales cada átomo está asociado con dos estados. Los orígenes químicos del *band gap* se indican considerando una aleación binaria *AB*. Se describe la clasificación de los metales y aislantes de acuerdo a la teoría de bandas y el concepto de enlace metálico se introduce como un enlace covalente insaturado.

Palabras clave: Mecánica cuántica, bandas de energía, estructura de bandas.

Abstract

In crystalline material exists energy *band gaps* where the electrons can move freely, so, these bands are the results of atomic levels superposition that form a crystal. When the individuals' atoms are closing to form a crystal, they take a place in a periodic arrangement forming a crystalline lattice, where their atomic energy levels interact themselves, forming energy *band gaps*. A simple illustration of the atomic origins of some *band gaps* is given with an example of a linear chain of atoms in which each atom is associated with two states. The classification of metals insulates and semi conductors according with the *band gaps* theory is described and the concept of metallic bond is introduced as a unsaturated covalent bond.

Key words: Quantum mechanics, band gaps, bands structure.

PACS: 03.65.-w, 64.40.Kb, 71.20.-b

I. INTRODUCCIÓN

Al final del primer Congreso Solvay, en 1911, termina la etapa inicial de la historia de la teoría cuántica, en la que gran parte de la comunidad científica reconoció que en la suposición de Planck había “algo” real. En los trabajos de Einstein por primera vez se aplicaron estas ideas, esencialmente en osciladores armónicos. Las ideas cuánticas no se habían utilizado en otro tipo de sistemas, ni se sabía cómo hacerlo. Sin embargo, las aplicaciones hechas fueron suficientes para concluir que la física clásica era limitada. El problema entonces sería cómo desarrollar una teoría consistente [1].

En 1912, Niels Bohr se unió al grupo de Rutherford en Manchester, Inglaterra. Bohr llegó justo en un momento importante, cuando se investigaban las consecuencias del modelo atómico de Rutherford. Un problema al que de inmediato se dedicó Bohr fue el de la estabilidad del átomo propuesto. Bohr aplicó la física clásica a esta cuestión, dándose cuenta de que se llegaba a una inmensa

contradicción y que la estabilidad del átomo, según el modelo de Rutherford, no podía reconciliarse con los fundamentos de la mecánica de Newton y el electromagnetismo de Maxwell.

En 1913 se inicia la segunda etapa del desarrollo de la física cuántica, al publicar Niels Bohr su notable trabajo sobre la constitución de átomos y moléculas, en el cual aplicó las ideas cuánticas a la estructura del átomo de hidrógeno.

Bohr trabajó con el átomo de hidrógeno, ya que solamente tiene un electrón y encontró los valores de las frecuencias que debería tener la radiación emitida por el electrón. Resultó que estos valores que obtuvo concordaban, con los valores experimentales que se conocían desde hacía mucho tiempo. Además, encontró en términos de la constante de Planck, de la masa y de las cargas eléctricas del electrón, una cantidad que se había obtenido empíricamente, en relación a los espectros de los átomos, que es la llamada constante de Rydberg. Asimismo, Bohr predijo la existencia de otras líneas del

espectro que no caían en la región visible, sino en el ultravioleta extremo y en el infrarrojo extremo. Parte de estas predicciones fueron verificadas experimentalmente por T. Lyman en 1914, otra parte por F. Brackett en 1922 y otra parte más por A. H. Pfund en 1924 [2].

En noviembre de 1924, Louis de Broglie presentó en la Universidad de París su tesis doctoral “Investigaciones sobre la teoría de los cuanta”. Al realizar este trabajo, De Broglie estuvo muy influenciado, entre otras cosas, por el trabajo de Einstein de 1905 sobre los cuantos de radiación (fotones) así como por algunas ideas de su teoría de la relatividad especial.

Hasta ese momento se había aceptado, aunque no entendido muy bien, el carácter dual de la radiación: en ciertas circunstancias la luz se comportaba como onda y en otras, como partícula. L. de Broglie avanzó un paso al llegar a la idea de que, al igual que la luz, la materia también debería tener este comportamiento dual [3].

Posteriormente, Schrödinger demostró que la mecánica ondulatoria y la mecánica de matrices son versiones matemáticas diferentes de una misma teoría, hoy denominada mecánica cuántica. Incluso en el caso del átomo de hidrógeno, formado por sólo dos partículas, ambas interpretaciones matemáticas son muy complejas. El siguiente átomo un poco más complejo (en comparación con el hidrógeno), el de helio, tiene tres partículas, e incluso en el sistema matemático relativamente sencillo de la dinámica clásica, el problema de los tres cuerpos (la descripción de las interacciones mutuas de tres cuerpos distintos) no se puede resolver por completo. Sin embargo, sí es posible calcular los niveles de energía. La elección depende de la conveniencia de la formulación para obtener soluciones aproximadas apropiadas.

Todos estos trabajos de investigación llevados a cabo a principios del siglo pasado han ayudado a desarrollar lo que ahora conocemos como mecánica cuántica, que permite determinar y conocer las características electrónicas de los materiales así como su comportamiento subatómico, esto hace posible entender el por qué los metales son buenos conductores de la electricidad y del calor. Si la banda está parcialmente desocupada es factible la dispersión de electrones a estados desocupados, entonces existe flujo de electrones en el material, que determina el comportamiento de los metales. Si la banda está llena los electrones pasan a través del material, si existen estados desocupados en bandas de energía más altas sólo accesibles por excitación térmica por lo que el material se considera aislante. Un semiconductor es un material que se comporta como conductor o como aislante dependiendo del campo eléctrico en el que se encuentra. La configuración de las últimas bandas de energía son las de mayor interés en la conductividad eléctrica. Si la banda más externa no está completamente llena se denomina banda de conducción, pero si está llena se denomina banda de valencia. La diferencia de energía existente entre el máximo de la banda de valencia y el mínimo de la banda de conducción se le llama “*band gap*” (*E_g*). Así, para que un material pueda conducir electricidad, los electrones de la banda de valencia tienen que “saltar” a la banda de conducción y requieren una energía *E_g* como mínimo, la

cual es del orden de unos cuantos electrón-volts (eV). Un material semiconductor tiene un *band gap* pequeño de alrededor de 1eV, de tal manera que los electrones pueden saltar a la banda de conducción con la energía térmica que pueden recibir de sus alrededores. Al saltar un electrón a la banda de conducción, deja un estado vacío en la banda de valencia que se le denomina “*hueco*”. Los huecos pueden tratarse como partículas con carga igual a la de los electrones, pero positiva. Es por esto que en un semiconductor puede haber flujo de electrones en la banda de conducción y flujo de huecos en la banda de valencia.

La ciencia de materiales en la actualidad busca relacionar las propiedades de estos para determinar las aplicaciones en equipos y dispositivos cada vez más sofisticados y con mejores propiedades, tanto electrónicas como mecánicas. Sabemos que las propiedades de los materiales están determinadas por su comportamiento electrónico desde el punto de vista atómico, y que dependen de su arreglo atómico cristalino. Desde los años 20's a 30's, surgió una nueva forma de la estructura electrónica de los materiales, más bien desde un punto de vista químico que del físico, aunque mucho de este trabajo ha sido realizado por los físicos. Para entender las propiedades de los materiales cristalinos y no cristalinos debemos tomar en cuenta diferentes puntos de vista y colocarnos en un problema del espacio real. Estas ideas no son nuevas, ya que en los años 20's y 30's del siglo XX, cuando se empezó a analizarse más a fondo la teoría de bandas en los sólidos, los físicos del estado sólido, y también los químicos trataron de entender las propiedades de los sólidos en términos de enlaces individuales. La teoría moderna nos permite analizar ya sea el punto de vista del espacio real o del espacio recíproco. El objetivo es entender que existe una relación entre la estructura de bandas de energía y el comportamiento atómico local y las propiedades electrónicas.

En la sección II mencionamos cómo se forman las bandas de energía considerando un modelo simple asociado a los estados en que se encuentra un átomo de acuerdo a su número cuántico. En la sección III, se muestra un modelo del origen de las bandas de energía considerando una cadena lineal de átomos donde se asocia un átomo a dos estados de energía, así como los principios químicos de las bandas de energía considerando una aleación binaria *AB*. En la sección IV, se muestra un análisis de la variación que sufren las bandas de energía en un semiconductor en función de la temperatura y que provocan una expansión en la celda cristalina del semiconductor. En la sección V se hace un análisis general de los orígenes de las bandas de energía y qué información nos proporciona las características que posee un material en relación a las bandas de energía. Finalmente, en la sección VI mostramos nuestras conclusiones.

II. FORMACIÓN DE LAS BANDAS DE ENERGÍA

El análisis de la formación de bandas basado en un modelo simple considerando únicamente la banda *s*, donde asociamos un estado *s* con cada átomo, nos lleva a una

banda de estados. El modelo de la banda s es un simplificación burda, ya que un átomo está asociado con más de un estado s . Dependiendo del valor del número cuántico principal puede haber estados s, p, d, \dots dentro de cada capa del átomo. A energías más altas, hay un continuo de estados de energía del electrón libre, los cuales lejos del átomo se representan por ondas planas. En este artículo nos enfocaremos sólo a los electrones de valencia. En el estado sólido, a presiones normales, los estados permanecen enlazados al núcleo y por lo tanto no elevan las bandas de energía. Se obtiene que existe una banda para cada estado de valencia en una celda unitaria de un cristal. Por lo tanto, si hay N_a átomos en la celda unitaria y N_v estados de valencia asociados a cada átomo, entonces hay $N_a N_v$ bandas. Los *gaps* de las bandas son rangos de energía en la cual no caen las bandas de energía, estos no sólo son importantes por las propiedades eléctricas y ópticas que comunican a los materiales, sino también pueden estabilizar un cristal en una estructura en particular [4].

La figura 1 muestra los cambios en los niveles de energía del electrón de un conjunto infinito de átomos en un cristal, así como el parámetro de red es reducido de $1 m$ a 1 \AA . Cuando los átomos están separados $1 m$, los dos estados de valencia de cada átomo no interactúan con estados de otros átomos (ejemplo, la probabilidad de tunelaje del electrón entre los átomos es despreciable).

Cuando los átomos llegan a estar dentro del rango de tunelaje uno con respecto al otro (del orden de 10 \AA), hay una probabilidad finita de que un electrón brinque de un átomo al siguiente y se produzca la formación de la banda. El ancho de la misma se incrementa en proporción al aumento de la probabilidad de tunelaje, el cual está determinado por la integral de salto. Eventualmente, en algunas densidades críticas, las bandas de energía empiezan a traslaparse y aumentan la densidad que amplía las bandas y provoca un mayor traslape de estas. Sin embargo, si la densidad de equilibrio del material está debajo de la densidad crítica, entonces hay un *gap* de energía entre las bandas.

Los dos estados atómicos de la figura 1, podrían tener dos orígenes distintos. La primera posibilidad es que son dos estados atómicos en el mismo átomo, por ejemplo los estados $1s$ y $2s$. La segunda posibilidad es que se refiera a estados en dos átomos distintos en la celda de un cristal, por ejemplo un estado en un átomo A y un estado en un átomo B en una aleación AB . Estas posibilidades son consistentes con el panorama de que el *band gap* tiene un origen atómico o químico. Una posible característica engañosa de la figura 1 es el hecho de que las dos bandas de estado provienen de dos estados atómicos a la izquierda. Podríamos pensar que los estados en la banda superior están formados a partir de combinaciones lineales de los estados atómicos superiores en átomos a través del cristal. Esto es incorrecto, ya que las bandas son mezclas de estados atómicos. Los estados moleculares son funciones de Bloch no de estados atómicos puros sino de combinaciones de estados atómicos llamados “*híbridos*”, esta mezcla de estados atómicos es llamada “*Hibridación*”.

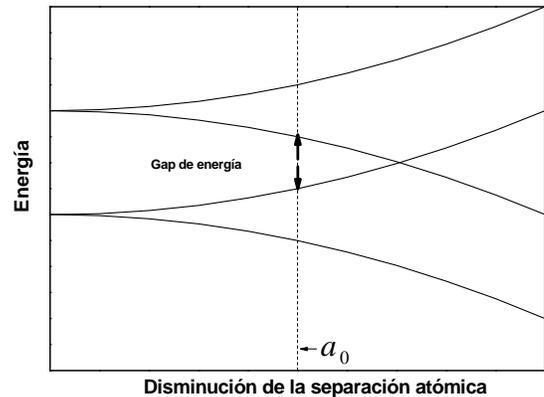


FIGURA 1. Se muestra los dos niveles de energía en cada átomo de un cristal infinito ensanchado en las bandas, tanto que el parámetro de red es reducido a partir de un valor muy grande, donde el salto del electrón no ocurre, al valor a_0 , perteneciendo al cristal en equilibrio. En a_0 , las bandas de energía están separadas por un *gap*.

III. CADENAS INFINITAS

Consideremos una cadena lineal infinita de átomos con espaciamiento atómico a y condiciones periódicas de frontera aplicadas en los extremos de la cadena. Cada átomo está asociado a dos estados $|1\rangle$ y $|2\rangle$.

Los elementos de la matriz Hamiltoniana son todos cero excepto para las integrales de salto entre átomos vecinos y los elementos de la matriz localizados. Si ε_1 y ε_2 están además en los elementos de matriz localizados en $\langle 1|H|1\rangle$ y $\langle 2|H|2\rangle$ con ε_1 y ε_2 , y si $|m,1\rangle$ y $|m,2\rangle$ indican los estados $|1\rangle$ y $|2\rangle$ en un átomo m , entonces las integrales de salto β_1, β_2 , y β_2 son por lo general diferentes de cero:

$$\begin{aligned} \langle m,1|H|m \pm 1,1\rangle &= \beta_1, \\ \langle m,1|H|m \pm 1,2\rangle &= \beta_{12}, \\ \langle m,2|H|m \pm 1,2\rangle &= \beta_2, \end{aligned} \tag{1}$$

así suponemos que las integrales de salto entre diferentes estados atómicos en átomos vecinos son las mismas. El modelo tiene por lo tanto cinco parámetros $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \beta_1, \beta_{12}$, y β_2 .

Debido a que hay una simetría traslacional podemos aplicar el teorema de Bloch. Sin embargo, ya que hay dos estados en cada sitio atómico, el teorema de Bloch establece una combinación lineal de los estados atómicos:

$$\Psi_k^{(n)} = N^{-\frac{1}{2}} \sum_m e^{ikma} (c_1^{(n)}(k)|m,1\rangle + c_2^{(n)}(k)|m,2\rangle), \tag{2}$$

aquí $(c_1^{(n)}(k)|m,1\rangle + c_2^{(n)}(k)|m,2\rangle)$ es el estado híbrido, por ejemplo de una combinación lineal de estados

atómicos en un átomo m . Para asegurar que éste estado híbrido está normalizado requerimos que:

$$|c_1^{(n)}(k)|^2 + |c_2^{(n)}(k)|^2 = 1. \quad (3)$$

en donde (n) anticipa el hecho que en cada k habrá dos eigenestados los cuales deberán etiquetarse con $n=1$ y $n=2$. n es llamada el índice de la banda. Así, los números cuánticos para los eigenestados del sistema son el vector de onda k y el índice de banda n . La suma en la Ec. (2) de todos los sitios atómicos m y el factor $N^{-1/2}$ es para normalizar el estado de Boch, donde N es el número (infinito) de sitios atómicos de la cadena.

La ecuación de Schrödinger puede ser escrita como

$$H|\Psi_k^{(n)}\rangle = E|\Psi_k^{(n)}\rangle, \quad (4)$$

sustituyendo la Ec. (2) para en la Ec. (4) tenemos:

$$\sum_m e^{ikma} (c_1^{(n)}(k)H|m,1\rangle + c_2^{(n)}(k)H|m,2\rangle) = E_k^{(n)} \sum_m e^{ikma} (c_1^{(n)}(k)|m,1\rangle + c_2^{(n)}(k)|m,2\rangle), \quad (5)$$

proyectando la Ec. (5) sobre los estados $|0,1\rangle$, y multiplicando la izquierda por $\langle 0,1|$ tenemos que satisface la ecuación de Euler:

$$0 = (\varepsilon_1 + 2\beta_1 \cos(ka) - E_k^{(n)})c_1^{(n)} + 2\beta_{12} \cos(ka)c_2^{(n)}, \quad (6)$$

similarmente, proyectando la Ec. (5) sobre $|0,2\rangle$, multiplicando a la izquierda por tenemos:

$$0 = 2\beta_{12} \cos(ka)c_1^{(n)} + (\varepsilon_2 + 2\beta_2 \cos(ka) - E_k^{(n)})c_2^{(n)}, \quad (7)$$

las Ecs. (6) y (7) son ecuaciones seculares. Hay dos ecuaciones debido a que hay dos estados atómicos base en la celda unitaria. Para soluciones no triviales requerimos que el determinante secular sea cero:

$$0 = \begin{vmatrix} \varepsilon_1 + 2\beta_1 \cos(ka) - E_k^{(n)} & 2\beta_{12} \cos(ka) \\ 2\beta_{12} \cos(ka) & \varepsilon_2 + 2\beta_2 \cos(ka) - E_k^{(n)} \end{vmatrix}.$$

Expandiendo el determinante obtenemos una ecuación cuadrática con las raíces:

$$E_k^{(1)} = \frac{g_1(k) + g_2(k)}{2} - \left(\left(\frac{g_1(k) - g_2(k)}{2} \right)^2 + 4\beta_{12}^2 \cos^2(ka) \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (8)$$

y

$$E_k^{(2)} = \frac{g_1(k) + g_2(k)}{2} + \left(\left(\frac{g_1(k) - g_2(k)}{2} \right)^2 + 4\beta_{12}^2 \cos^2(ka) \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (9)$$

en donde:

$$g_1(k) = \varepsilon_1 + 2\beta_1 \cos(ka) \quad (10)$$

y

$$g_2(k) = \varepsilon_2 + 2\beta_2 \cos(ka).$$

Estas dos soluciones están graficadas como una función de k en la Fig. 2. Reconocemos a $g_1(k)$ como la estructura de banda para la cadena lineal infinita si hubiera sólo estados $|1\rangle$ asociados con los átomos. Luego, $g_2(k)$ es la estructura de banda para una cadena infinita si solamente hubiera estados $|2\rangle$, asociados con los átomos. En la Fig. 3, la banda inferior $E_k^{(1)}$ cae de $g_1(k)$ y $g_2(k)$, mientras que la banda superior $E_k^{(2)}$ cae arriba de $g_1(k)$ y $g_2(k)$, excepto en $k = \pm\pi/2a$ donde $E_k^{(1)} = g_1(k)$ y $E_k^{(2)} = g_2(k)$.

Por otra parte, observamos que el efecto de los estados acoplados $|1\rangle$ y $|2\rangle$ sobre los átomos adyacentes, a través de β_{12} aumenta la diferencia de energía entre las dos bandas $g_1(k)$ y $g_2(k)$. Este efecto disminuye a medida que la diferencia de energía $|g_1(k) - g_2(k)|$ se incrementa a medida que $|\beta_{12}|$ decrece.

A cualquier valor particular de k hay obviamente un *gap* de energía entre $E_k^{(1)}$ y $E_k^{(2)}$, pero esto no significa que sea un *gap* de energía. Cuando hablamos de un *gap* de energía, significa que hay un rango de energías donde no hay eigenvalores para todos los vectores de onda. Así hay un *gap* en la densidad de estados como una función de la energía, esto se obtiene en la Fig. 3 si el máximo de la banda inferior está por abajo del mínimo de la banda superior, lo cual se alcanza cuando los parámetros ε_1 , ε_2 , β_1 , β_2 y β_{12} , satisfacen una simple desigualdad. Esto se ilustra en la Fig. 3, donde la densidad de estados correspondientes se muestra también a la derecha de la estructura de banda [4]. Así los *band gaps* surgen a partir de los conjuntos base extendiéndose a cada átomo incluyendo estados de energía atómicos más altos.

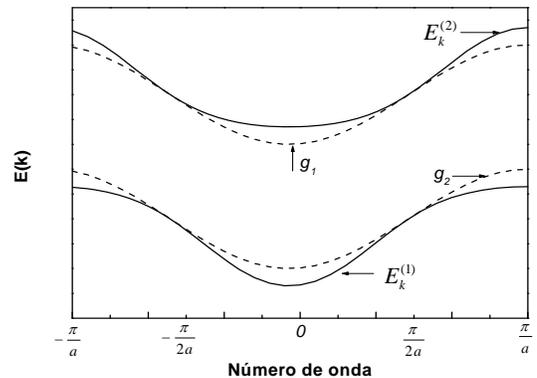


FIGURA 2. Las bandas de energía $E_k^{(1)}$ y $E_k^{(2)}$, dadas por las Ecs. (9) y (10) para un anillo infinito en el cual cada átomo está asociado con dos estados con energías localizadas ε_1 , ε_2 . Las curvas etiquetadas $g_1(k)$ y $g_2(k)$ son las bandas de energía en ausencia de saltos β_{12} entre los estados $|1\rangle$ y $|2\rangle$ sobre átomos adyacentes como se muestra en la Ec. (11). Nótese que es menor que $g_1(k)$ y es mayor que $g_2(k)$ en todos los vectores de onda excepto para $k = \pm\pi/2a$.

Si consideramos una cadena lineal de átomos A y B en una aleación, cada átomo está asociado con un sólo estado, y se obtienen dos bandas de estados, una de enlace y otra de antienlace. El *gap* de energía es la diferencia en energía entre el máximo de estados enlazados y el mínimo de estados no enlazados, la cual es sólo $\varepsilon_A - \varepsilon_B$. En este caso el *band gap* es una consecuencia de la presencia de dos átomos distintos en una celda unitaria.

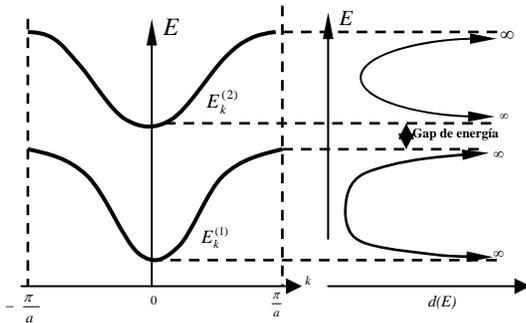


FIGURA 3. A la izquierda vemos la bandas de energía $E_k^{(1)}$ y $E_k^{(2)}$ mostradas en la Fig. 2. A la derecha la densidad de estados correspondientes $d(E)$ está graficada como una función de la energía. Hay un *gap* de energía indirecto entre el máximo de $E_k^{(1)}$ y el mínimo de $E_k^{(2)}$

Para entender el valor del cambio del *gap* de energía, es necesario conocer la densidad de estados y la energía de los orbitales electrónicos. Se requieren simulaciones basadas en la teoría de la densidad funcional (Density Functional Theory) para calcular la función de onda electrónica y su periodicidad. Para esto se puede emplear un software de alta confiabilidad y reputación como el programa de simulación Viena.

IV. BAND GAP EN UNA DIMENSIÓN

Dentro de cada *gap*, la luz es completamente reflejada (Bragg), resultando una fuerte dispersión cerca de las frecuencias críticas del *gap*. Los eigenmodos de las ecuaciones de Maxwell en la vecindad del *gap*, son también modificados. En lugar de las ondas planas usuales, los eigenmodos llegan a ondas cuasiestáticamente moduladas, con una onda pura permanente se llega a alcanzar exactamente al número de onda para la resonancia. En este caso hay dos posibles ondas permanentes con diferentes fases espaciales.

Estas son familiares en la teoría electrónica del *band-gap*, y tienen la propiedad usual de que una tiene una eigenfrecuencia arriba y la otra abajo, de la frecuencia central del *gap*. La propagación de un campo libre con una frecuencia en la región del *gap* es, claro, prohibido. Sin embargo, en presencia de un medio no lineal, es posible que la propagación pueda ocurrir a un cambio de fase no lineal [6].

Las bandas de energía de semiconductores exhiben grandes cambios con la temperatura a presión constante. Hay dos efectos que contribuyen a estos cambios: el

primero es la expansión térmica de la celda, relacionada al cambio de energías del electrón con el volumen, y el segundo efecto es la renormalización directa de las bandas de energías debido a las interacciones electrón-fonón [7].

La expresión completa del cambio del *gap* E_g con la temperatura es:

$$\left(\frac{\partial E_g}{\partial T}\right)_p = \left(\frac{\partial E_g}{\partial T}\right)_{E_p} + \left(\frac{\partial E_g}{\partial T}\right)_{TE}, \quad (11)$$

en donde

$$\left(\frac{\partial E_g}{\partial T}\right)_{TE} = -3\alpha B \left(\frac{\partial E_g}{\partial p}\right)_T, \quad (12)$$

siendo $\alpha = L^{-1} \left(\frac{\partial L}{\partial T}\right)$ el coeficiente de expansión lineal y

$B = -V \left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T$ el módulo de expansión volumétrica. Los

cambios del *gap* inducidos por la expansión térmica son obtenidos usualmente de valores experimentales de α , B y la variación del *gap* con la presión hidrostática, medida en experimentos a presión alta.

El efecto de la interacción electrón-fonón, por otra parte, implica el cálculo de dos tipos de procesos, los términos Debye-Waller (DW) y el Self-Energy (SE). Estos términos surgen de la teoría de perturbaciones hasta un segundo orden y ambos son proporcionales al cuadrado del desplazamiento atómico u , proporcional a T , esto es, a mayor T mayor u y ambos términos DW y SE aumentan. El término DW está relacionado con la segunda derivada del potencial en primer orden de la teoría de perturbaciones y es más fácil de evaluar. El término SE contiene la primera derivada del potencial del cristal (interacción electrón-fonón) y está dado por el segundo orden de la teoría de perturbaciones (emisión y reabsorción de un fonón y viceversa). Para obtener el término SE se tiene que sumar sobre todos los estados intermedios, *i.e.*, se debe llevar a cabo una integración en el espacio k . Algunas veces este término puede despreciarse ya que la corrección DW produce una contribución más importante. Sin embargo, en años recientes ha sido más reconocido que se tiene que incluir ambos tipos de términos para calcular la variación del *gap* con la temperatura [7, 11].

IV. CONCLUSIONES

El estudiar el carácter electrónico de los materiales con el comportamiento químico y atómico, relacionado con las bandas de energía acerca de los orígenes atómicos del *band gap* nos permite clasificar a los materiales de acuerdo a la teoría de bandas en materiales conductores, semiconductores y aislantes.

Podemos cambiar las propiedades de un material variando el ancho de la banda de energía, lo que provoca un cambio en el color de la luz que se producirá cuando los pares electrón-hueco se recombinen. La posibilidad de cambiar el *band gap* de los semiconductores por medio de la variación de las composiciones químicas de compuestos

y aleaciones, ha tenido un impacto impresionante en el desarrollo científico y tecnológico de estos materiales.

La formación de las bandas de energía es importante, ya que nos permite conocer el comportamiento de los materiales desde el punto de vista de sus propiedades electrónicas, lo que nos ayuda a caracterizar y desarrollar nuevos materiales para aplicaciones más específicas, puesto que actualmente el desarrollo tecnológico y científico requiere de un conocimiento más detallado de las propiedades de los materiales modernos que permita aplicaciones más especializadas de éstos.

AGRADECIMIENTOS

Se agradece a R. Sánchez, E. Marín y H. Luna por sus comentarios y observaciones a este trabajo. César Mora es becario EDI y COFAA-IPN, H. Herrera Suárez es becario PIFI-IPN y CONACYT, y agradece el apoyo brindado por la Universidad de Ibagué – Coruniversitaria. Este trabajo fue realizado con apoyo del proyecto de investigación SIP-20071481.

REFERENCIAS

- [1] Brown, E. (*Una faceta desconocida de Einstein*. Fondo de Cultura Económica, 2da. Edición, México, 1997).
- [2] Gribbin, J. (*En busca del gato de Schrödinger*, Salvat Editores, Barcelona, 1994).
- [3] Abragam, A., *Mundo Científico* **12**, 952 (1992).
- [4] Sutton, A. P. (*Electronic Structure of Materials*, Clarendon Press-Oxford, New York, 1993).
- [5] He, H. and Drummond, D., *Phys. Rev. E* **54**, 896 (1998).
- [6] Allen, P. B. and Heine, V., *J. Phys. C* **9**, 2305 (1976).
- [7] Allen, P. B. and Cardona, M. *Phys. Rev. B* **27**, 4760 (1983).
- [8] Lautenschlager, P., Allen, P. B. and Cardona, M. *Phys. Rev. B* **31**, 2163 (1985).
- [9] Krishnamurthy, S., Chen, A., Sher, A. and Van Schilfggilde, M., *J. Electronic Matter* **24**, 1121 (1995).
- [10] Olguín, D., Cantarero, A. and Cardona, M. *Phys. Stat. Sol. (b)* **220**, 33 (2000).