

# BANDAS DE ENERGIA: UN MODELO ELEMENTAL

**Casio R. Oré**

## ***1. Introducción***

*Una de las maneras de presentar el concepto de Bandas de Energía en sólidos es la basada en la teoría denominada “Aproximación de Electrones Fuertemente Ligados” [1]. Se considera un grupo de átomos bastante separados unos de otros. En tal situación cada átomo exhibe sus propias funciones de onda con sus correspondientes valores para las energías, que por otro lado son comunes para todos ellos si se trata del mismo elemento. A continuación, se van acercando los átomos. Las funciones de onda se traslapan y es el momento que dicho conjunto de átomos debe tomarse como un sistema único (un sólido) sujeto a las reglas de la mecánica cuántica.*

La función de onda del sistema de  $N$  átomos y los respectivos valores de la energía no son los mismos que para un átomo aislado, pues, de serlo, se tendría  $N$  electrones con el mismo juego de números cuánticos, situación no

permitida por el principio de exclusión. Pero, por otro lado, los valores permitidos de la energía no deben diferenciarse mucho del que tenían estando los átomos aislados. La solución de compromiso a estas dos exigencias consiste en admitir que cada nivel atómico varía ligeramente dando lugar a N niveles muy cercanos unos de otros. Como N es del orden del número de Avogadro, los N niveles forman un continuo: una banda.

En una versión simplificada se afirma que si dos átomos se unen, cada nivel energético se transforma en dos niveles muy próximos entre sí. Una verificación experimental relacionada con esta afirmación se logra buscando frecuencias acústicas resonantes en el aire contenido en dos tubos iguales puestos uno a continuación del otro, con un pequeño intervalo de separación entre ellos. Por cada frecuencia resonante que aparecía en un solo tubo, se tienen ahora 2 frecuencias muy próximos a aquél [2].

La experiencia mencionada sugiere la búsqueda de un marco teórico que permita calcular este desdoblamiento y es el motivo del presente trabajo. Se necesita previamente un modelo.

## II. Modelo

En una aproximación rústica, los elementos pertenecientes a un átomo aislado pueden ser considerados como si estuviesen en un pozo de potencial creado por el núcleo. Simplificando aún más este modelo, puede considerarse el pozo con paredes al potencial infinito y un potencial cero en la región entre paredes. En este caso, si L es el ancho del pozo, los niveles de energía están dados por [3]

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}, \quad n = 1, 2, \dots$$

Un par de átomos muy próximos entre sí puede ser representado por dos pozos de potencial, uno al costado del otro. La interacción entre átomos modifica el valor del potencial en las paredes vecinas: en lugar de infinito se tiene allí un potencial finito V, fig. 1.

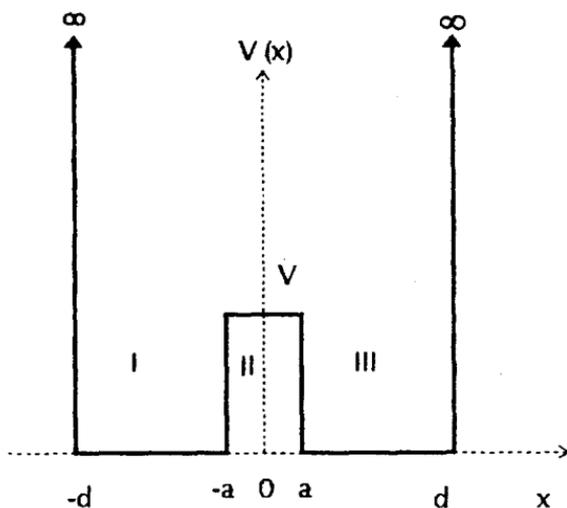


Fig. 1 Potencial utilizado

Este es el modelo que se utilizará para el objetivo buscado. El potencial propuesto aparece ordinariamente en textos de mecánica cuántica como un ejercicio para familiarizarse con la ecuación de Schrodinger. Aplicadas las condiciones de frontera, se obtiene una expresión trascendental para los autovalores de la energía. Es aquí donde se abandona el problema. D. Ter Haar [4] va un poco más al buscar soluciones aproximadas que limitan bastante su validez. Las funciones de onda por él utilizadas no exhiben la obvia simetría que proporcionan dos átomos idénticos.

Existe en la literatura un caso más completo (y más complejo). Se trata del cálculo de bandas de energía para una red unidimensional de 12 pozos de potencial [5]. El algoritmo no es complicado pero requiere mucho tiempo de computación, pues, inicialmente se propone un valor tentativo para la energía y con él se pone en marcha el programa. Si la función de onda satisface las condiciones de frontera, el valor propuesto es un valor permitido. Si no satisface, se propone un nuevo valor y se vuelve a calcular; y así sucesivamente. El resultado final es que el conjunto de valores permitidos forman bandas de energías.

El presente trabajo puede ser catalogado como intermedio entre estas dos versiones extremas. El modelo permite un tratamiento analítico adecuado para luego complementarse con una evaluación numérica.

### III. Solución analítica

En las regiones I y III la ecuación de Schrodinger adopta la forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dx^2} = Eu \quad (1)$$

mientras que en la región II

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dx^2} + Vu = Eu \quad (2)$$

Las soluciones toman la forma

$$\begin{aligned} u_I(x) &= A \operatorname{sen} k(d+x) & k &= \sqrt{2mE / \hbar^2} \\ u_{II}(x) &= B e^{Kx} + C e^{-Kx} & K &= \sqrt{2m(V-E) / \hbar^2} \\ u_{III}(x) &= D \operatorname{sen} k(d-x) \end{aligned} \quad (3)$$

En las expresiones anotadas ya fueron consideradas las paredes infinitas en  $x = \pm d$ . Se considerará; además, la condición  $E < V$ . La continuidad de las funciones de onda y de sus derivadas en las fronteras  $x = \pm a$  conduce a las relaciones

$$\begin{aligned} D \operatorname{sen} k(d-a) &= B e^{Ka} + C e^{-Ka} \\ -Dk \cos k(d-a) &= K(B e^{Ka} - C e^{-Ka}) \\ A \operatorname{sen} k(d-a) &= B e^{-Ka} + C e^{Ka} \\ Ak \cos k(d-a) &= K(B e^{-Ka} - C e^{Ka}) \end{aligned} \quad (4)$$

Para potenciales simétricos las funciones de onda deben ser simétricos o antisimétricos. Para que esto ocurra debe hacerse  $A = D$  (simétrico) o  $A = -D$  (antisimétrico).

Para  $A = D$ , las ecuaciones (4) conducen a  $B = C$  y a la expresión

$$-\frac{\tan k(d-a)}{\coth Ka} = \frac{k}{K} \quad (5)$$

mientras que para  $A = -D$  se tiene  $B = -C$  y la relación

$$-\frac{\tan k(d-a)}{\tanh Ka} = \frac{k}{K} \quad (5)$$

Para un valor dado de  $V$ , las ecuaciones (5) y (6) son satisfechas por un determinado conjunto de valores de  $k$  que se denotarán con  $k_n^s$  y  $k_n^a$ , respectivamente. Según (3), a cada valor  $k_n$  le corresponde un valor a la energía  $E_n$  con lo que se demostraría la cuantización de la energía. Por otro lado, los valores de la tangente hiperbólica no difiere mucho de los de la cotangente hiperbólica exceptuando los casos en los que el argumento sea próximo a cero; de manera que  $E_n^s$  va a tener un valor muy cercano a  $E_n^a$ . Debido a la periodicidad de la función tangente van a existir pares de soluciones  $k_n$ . Esta estructura de pares energéticos es lo que se proponía encontrar.

#### IV. Evaluación numérica

Una mejor comprensión del resultado obtenido podría lograrse efectuando evaluaciones numéricas para lo cual es necesario proporcionar valores adecuados. Para esto hagamos los cambios siguientes:

$$\begin{aligned} ka &= \sqrt{2mEa^2} / \hbar = w \\ ka &= \sqrt{2mVa^2 - 2mEa^2} / \hbar = \sqrt{b^2 - w^2} \end{aligned} \quad (7)$$

Las ecuaciones 5 y 6 toman ahora la forma

$$-\frac{\tan[w(r-1)]}{\coth \sqrt{b^2 - w^2}} = \frac{w}{\sqrt{b^2 - w^2}} \quad (8)$$

$$-\frac{\tan[w(r-1)]}{\tanh\sqrt{b^2-w^2}} = \frac{w}{\sqrt{b^2-w^2}} \quad r = d/a \quad (9)$$

Para considerar un caso concreto, notemos que  $d-a$  es el tamaño de cada "átomo unidimensional" y  $2a$  es la separación entre átomos. Debido a que éstos deben estar muy próximos entre sí, hagamos  $r = 21$ . Por otro lado,  $V$  está relacionado con  $b$ . Para una energía potencial del orden  $1 \text{ eV}$  y  $a$  del orden de  $4 \text{ \AA}$  puede tomarse  $b = 2$ .

Con los valores acordados se grafican los lados izquierdos de las ecuaciones teniendo a  $w$  como la variable. En el mismo dibujo se grafica el lado derecho. Los puntos de intersección  $w_n$  son las soluciones buscadas. La ubicación exacta de los valores de las  $w_n$  se logra mediante la elaboración de un pequeño programa suministrándole datos aproximados tomados de la gráfica, fig. 2. Para conseguir la diferenciación entre las  $w_n^s$  y las  $w_n^a$  hubo necesidad de ir hasta la sexta cifra decimal.

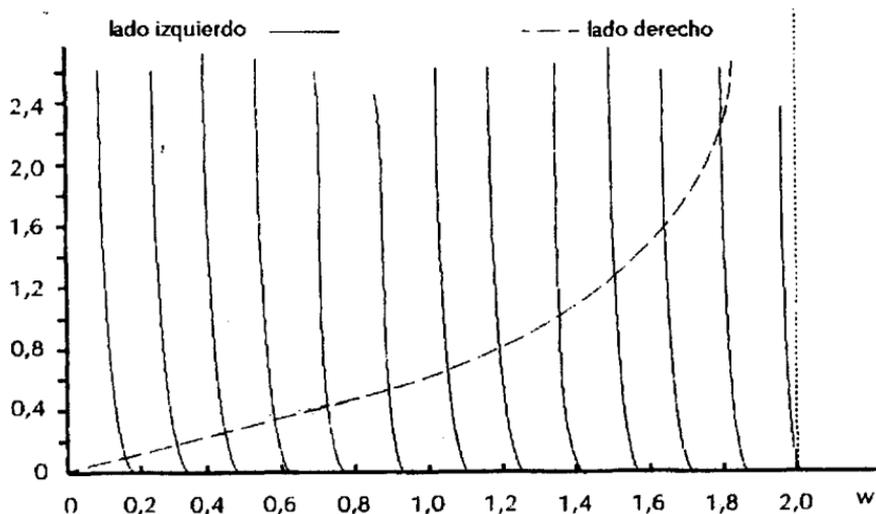


Fig. 2 Gráfica de los lados izquierdo y lado derecho de las ecuaciones 8 y 9 vs.  $w$ . Los lados izquierdos son indistinguibles

Como la función  $w/\sqrt{b^2 - w^2}$  tiene validez sólo en el rango  $0 < w < b$ , las raíces están restringidas a esta región. Por otro lado, debido a la periodicidad de la función tangente y a la presencia del signo menos, las raíces están restringidas a los intervalos  $(n-1/2)\pi < w(r-1) < n\pi$ . En la fig. 3 se presenta en detalle lo que ocurre para el primer par. Los valores numéricos obtenidos son consignados en la tabla 1.

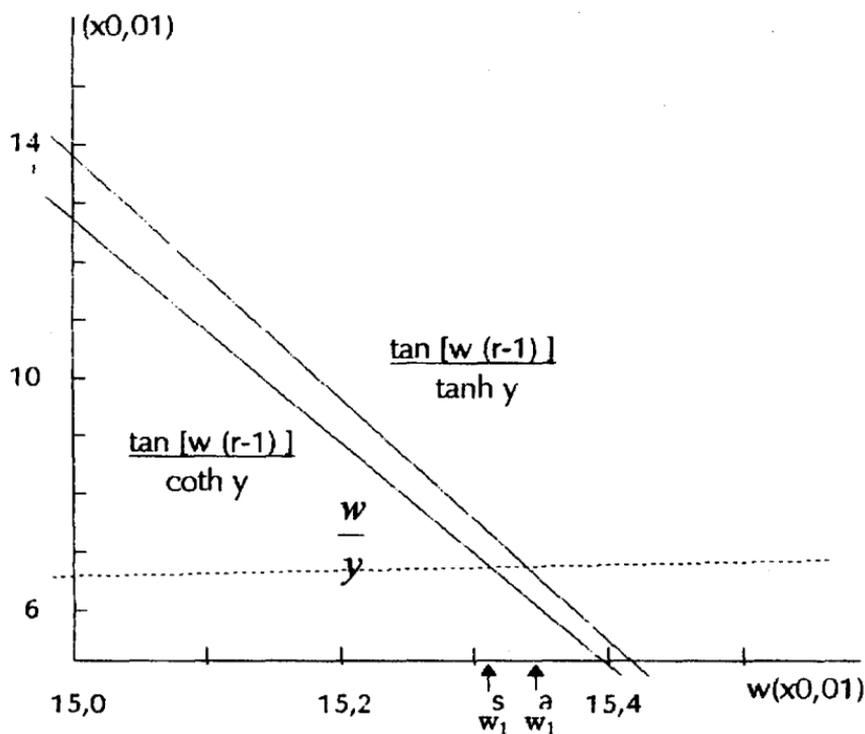


Fig. 3 Detalle que muestra el primer par de raíces ( $y = \sqrt{b^2 - w^2}$ )

Para obtener los niveles de energía, las raíces  $w_n$  obtenidas fueron llevadas a la relación (7)

$$E_n = \frac{h^2}{8m\pi^2 a^2} w_n^2 = 0,2368 w_n^2 \text{ eV}$$

$n$	$E_n^*(eV)$	$E_n^a(eV)$	$E_n^s(eV)$	$\Delta E_n (\times 10^{-3} eV)$
13	.....	=====	0,935065	
		=====		19,14
12	.....	=====	0,915928	
		=====		12,18
11	.....	=====	0,785536	
		=====		7,88
10	.....	=====	0,663122	
		=====		5,19
9	.....	=====	0,549866	
		=====		3,45
8	.....	=====	0,446495	
		=====		2,30
7	.....	=====	0,353448	
		=====		1,52
6	.....	=====	0,270999	
		=====		0,99
5	.....	=====	0,199323	
		=====		0,62
4	.....	=====	0,138539	
		=====		0,37
3	.....	=====	0,088723	
		=====		0,19
2	.....	=====	0,049931	
		=====		0,08
1	.....	=====	0,022199	
		=====		0,02

Tabla 1. Niveles de energía calculados con el potencial modelo propuesto.

A la izquierda y para propósitos de comparación se muestran los de un solo pozo de potencial con los mismos parámetros utilizados.  $\Delta E_n = E_n^s - E_n^s$

Para propósitos de comparación se consigna en la izquierda de la tabla 1 los niveles de energía de un solo "átomo de tamaño"  $L = d-a = 80 \text{ \AA}$ . Se observará que no hay mucha diferencia entre el par de niveles para dos "átomos" con los niveles de uno solo, sobre todo para niveles bajos. En forma general se puede mostrar que

$$\frac{E_n}{E_n^*} = \left( \frac{Lw_n}{\pi n} \right)^2 = \left( \frac{20w_n}{\pi n} \right)^2$$

Por ejemplo, para  $n = 1$ , la relación es 0,95.

Al costado derecho se ha colocado la diferencia de energía de cada par. Se observará que esta diferencia aumenta a medida que se tomen niveles más altos. Este es un resultado previsto y muy común en la teoría de bandas y se debe al hecho que energías más elevadas corresponden a funciones de onda que colocan a los electrones en lugares más alejados del núcleo, de manera que al aproximarse los átomos son las funciones que más interaccionan y debido a esto la banda es más ancha.

## V. Conclusión

Utilizando un modelo simple para el potencial, debido a dos átomos y mediante un cálculo muy sencillo, se ha comprobado que cuando dos átomos se juntan, cada nivel atómico se convierte en dos. Si se generaliza este resultado para un número muy grande de átomos que constituye un material sólido, habría el mismo número de niveles muy próximos entre sí constituyendo bandas.

## Referencias

- [1] *K.V. Shalinova*, Física de los semiconductores. Editorial Mir, Moscú 1975, p.37.
- [2] *H. Harreis*, International Conference. Teaching Modern Physics. World Scientific, SINGAPORE 1989, p.408.

- [3] *A. Messiah*, Quantum Mechanics.  
Wiley, New York, 1968, p.86.
- [4] *D. ter Haar*, Selected Problems in Quantum Mechanics.  
Academic Press, New York 1964, p.10.
- [5] *I.D. Johnston y D. Segal*, Electrons in a crystal Lattice:  
A simple computer model. Am.J.Phys. Vol.60, No.7, july 1992.