TEMA 4

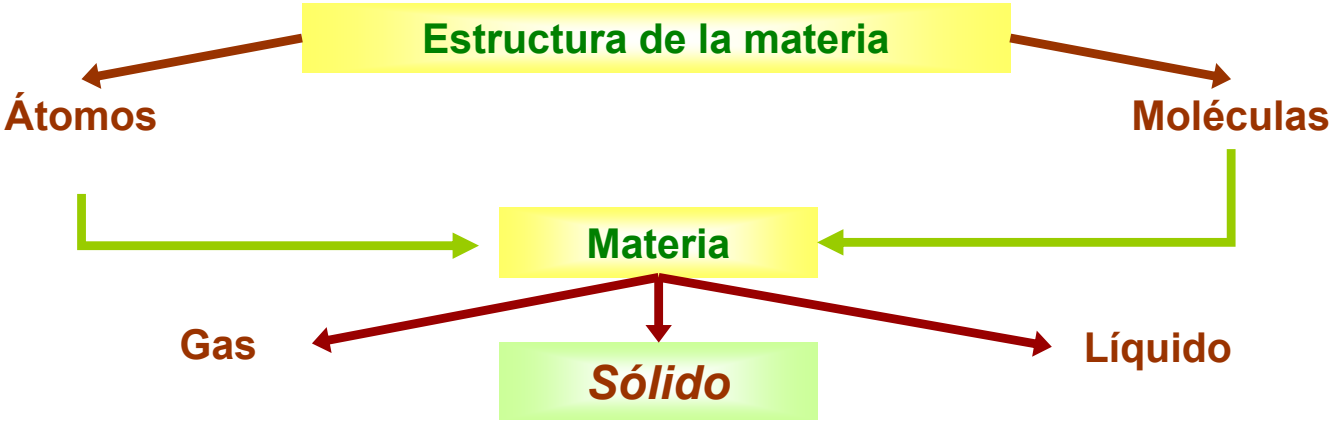
INTRODUCCIÓN A LA FÍSICA DEL ESTADO SÓLIDO

1. ESTRUCTURA DEL ESTADO SÓLIDO
2. TIPOS DE SÓLIDOS CRISTALINOS
   - 2.1. Tipos de enlace
   - 2.2 Sólidos cristalinos: propiedades y ejemplos
3. BANDAS DE ENERGÍA EN LOS SÓLIDOS
   - 3.1. Energía de Fermi
   - 3.2. Mecanismos de conducción
   - 3.3 Conductores, semiconductores y aislantes
4. MODELOS DE CONDUCCIÓN

Open Course Ware

Peula, J.M., Alados, I., Liger, E., Vargas, J.M. (2014) Fundamentos Físicos de la Informática.
OCW-Universidad de Málaga. http://ocw.uma.es.
Bajo licencia Creative Commons Attribution-Non-Comercial-ShareAlike 3.0

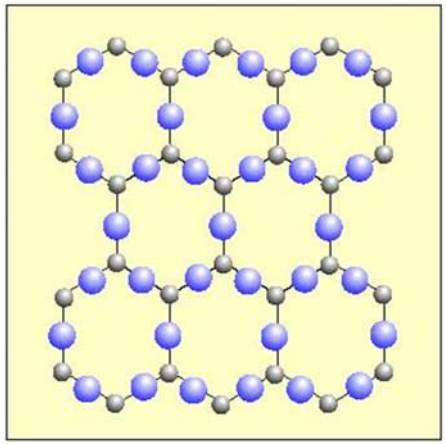
1. ESTRUCTURA DEL ESTADO SÓLIDO



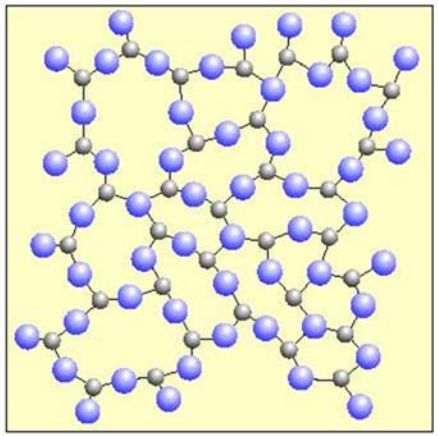
	Materia condensada	Materia gaseosa
AGREGACIÓN DE LA MATERIA	▪ Predominio de la **energía potencial de interacción** entre sus componentes ▪ **Orden espacial** en sus componentes	▪ Predominio de la **energía cinética de traslación** ▪ **Distribución caótica** de sus componentes
n (*densidad atómica*)	10^{28} átomos/m^3	10^{25} átomos/m^3
ρ (*densidad másica*)	10^3 kg/m^3	1 kg/m^3
Distancia interatómica	3 Å	200 Å

Open Course Ware

Peula, J.M., Alados, I., Liger, E., Vargas, J.M. (2014) Fundamentos Físicos de la Informática.
OCW-Universidad de Málaga. http://ocw.uma.es.
Bajo licencia Creative Commons Attribution-Non-Comercial-ShareAlike 3.0

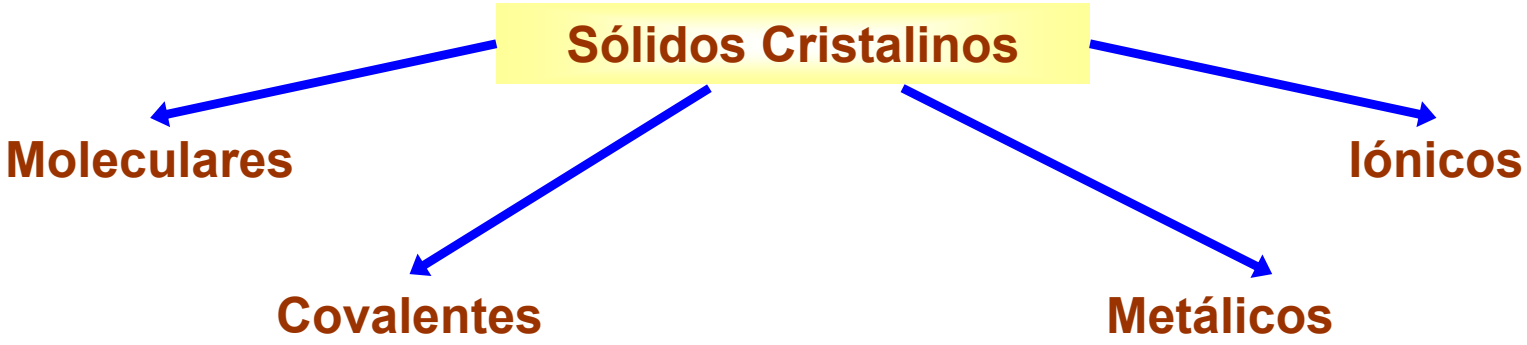


Sólidos amorfos o no cristalinos: los átomos o moléculas que los constituyen están dispuestos de manera aleatoria



Sólidos cristalinos: los átomos o moléculas o iones que los constituyen presentan una distribución ordenada. El patrón regular que se repite recibe el nombre de *red cristalina*

Muchas de las propiedades de los sólidos sólo pueden ser explicadas partir de su estructura, es decir, de la forma en que se distribuyen los átomos en el cristal y de los tipos de enlace interatómicos.



Open Course Ware

Peula, J.M., Alados, I., Liger, E., Vargas, J.M. (2014) Fundamentos Físicos de la Informática.
OCW-Universidad de Málaga. http://ocw.uma.es.
Bajo licencia Creative Commons Attribution-Non-Comercial-ShareAlike 3.0

2. SÓLIDOS CRISTALINOS

2.1. Tipos de enlace

Enlace de hidrógeno y Enlace de van der Waals ▼ **SÓLIDOS MOLECULARES** Están constituidos por moléculas que actúan como dipolos	**Enlace covalente** ▼ **SÓLIDOS COVALENTES** Formados por átomos que están ligados por electrones de valencia compartidos
Enlace iónico ▼ **SÓLIDOS IÓNICOS** Distribución de iones positivos y negativos alternados El enlace es debido a la atracción electrostática	**Enlace metálico** ▼ **SÓLIDOS METÁLICOS** Todos los iones del cristal comparten electrones (*gas electrónico*)

Open Course Ware

Peula, J.M., Alados, I., Liger, E., Vargas, J.M. (2014) Fundamentos Físicos de la Informática.
OCW-Universidad de Málaga. http://ocw.uma.es.
Bajo licencia Creative Commons Attribution-Non-Comercial-ShareAlike 3.0

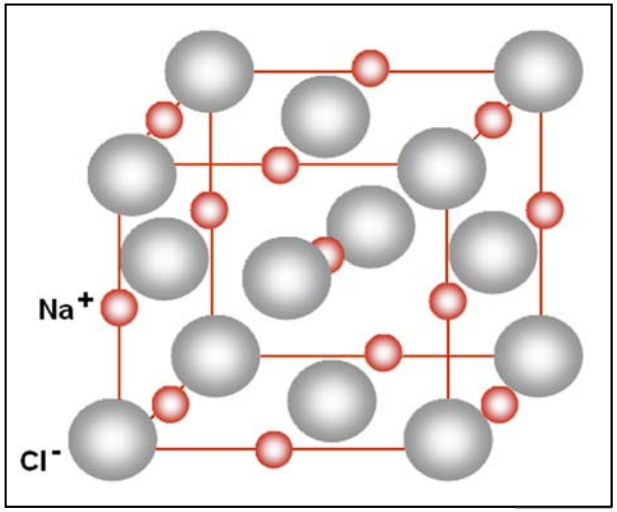
2.2. Sólidos cristalinos: propiedades y ejemplos

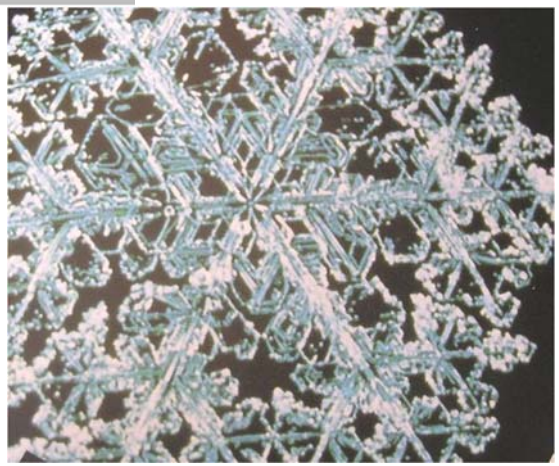
Cristales	Características	Propiedades	Ejemplos
Moleculares	Formados por moléculas Unidos por enlaces de van der Waals (1 kJ/mol) o enlaces por puente de hidrógeno	Blandos, compresibles y deformables Puntos de fusión bajos Malos conductores del calor y electricidad	SO_2, I_2, $H_2O(s)$
Covalentes	La cohesión cristalina se debe únicamente a enlaces covalentes (100-1000 kJ/mol)	Duros e incompresibles Malos conductores eléctricos y del calor	Carbón forma diamante, cuarzo (SiO_2)
Iónicos	La cohesión se debe a enlaces iónicos (50-100 kJ/mol) Formados por especies cargadas: aniones y cationes de distinto tamaño	Duros y quebradizos Puntos de fusión altos En estado líquido o fundidos son buenos conductores de la electricidad	NaCl, Al_2O_3, $BaCl_2$, sales y silicatos
Metálicos	Cada punto reticular está formado por un átomo de un metal Los electrones se encuentran deslocalizados por todo el cristal	Resistentes debido a la deslocalización Debido a la movilidad de los electrones, buenos conductores de la electricidad	Ca, Na, Li, Fe, Cu

Open Course Ware

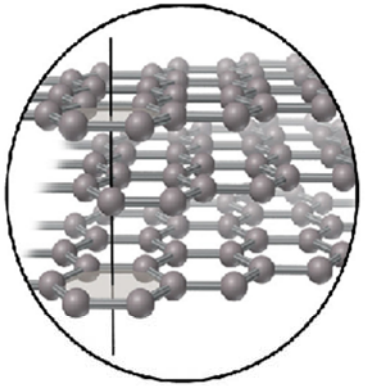
Peula, J.M., Alados, I., Liger, E., Vargas, J.M. (2014) Fundamentos Físicos de la Informática.
OCW-Universidad de Málaga. http://ocw.uma.es.
Bajo licencia Creative Commons Attribution-Non-Comercial-ShareAlike 3.0

Sólidos cristalinos: propiedades y ejemplos





Simetría hexagonal en un cristal de hielo



Grafito
Átomos dispuestos en anillos hexagonales en láminas

Diamante
Dos regiones cúbicas centradas en las caras y desplazadas y entrelazadas una respecto a la otra

Cristal de cuarzo

Open Course Ware

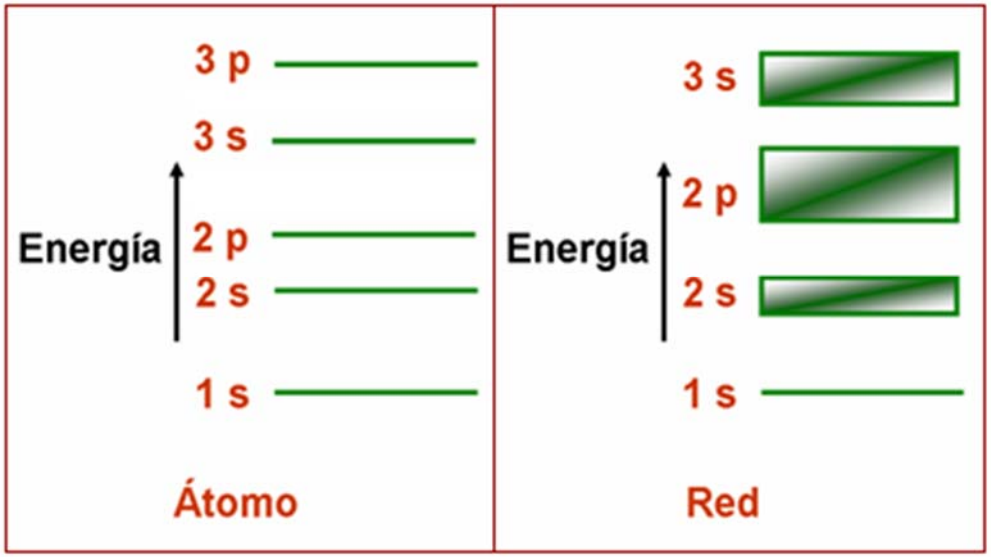
Peula, J.M., Alados, I., Liger, E., Vargas, J.M. (2014) Fundamentos Físicos de la Informática.
OCW-Universidad de Málaga. http://ocw.uma.es.
Bajo licencia Creative Commons Attribution-Non-Comercial-ShareAlike 3.0

3. BANDAS DE ENERGÍA

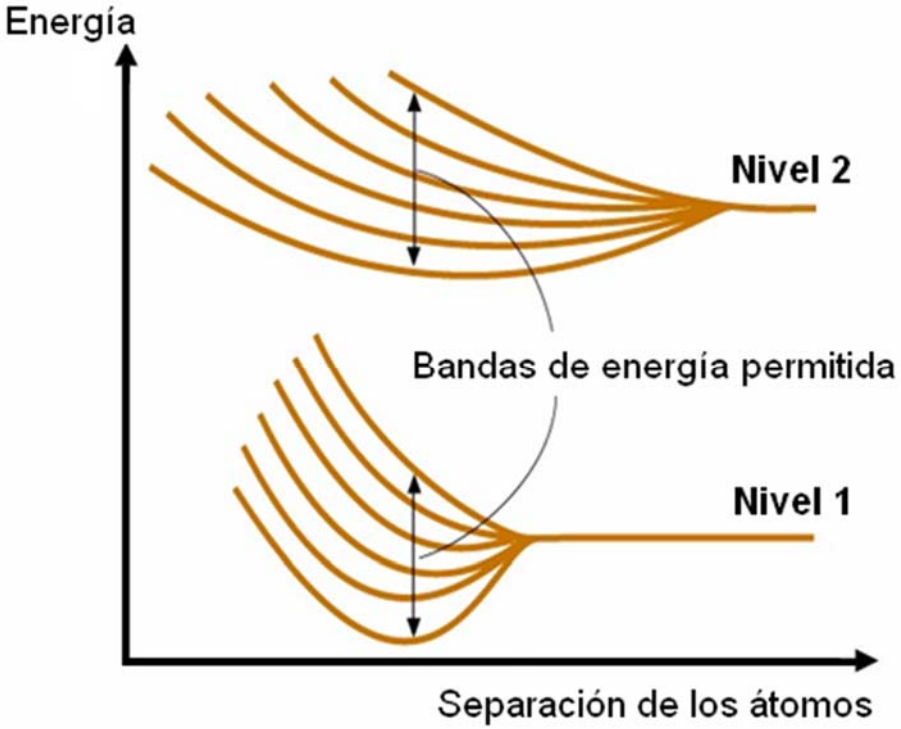
Los niveles energéticos de los átomos aislados se modifican al interaccionar éstos entre sí cuando forman parte de una red cristalina.

Cuando se considera un sólido, si N es el número de átomos, cada nivel energético se desdobla en N subniveles próximos agrupados en forma de bandas energéticas.

Niveles discretos de energía estrechamente espaciados recibe el nombre de BANDA DE ENERGÍA



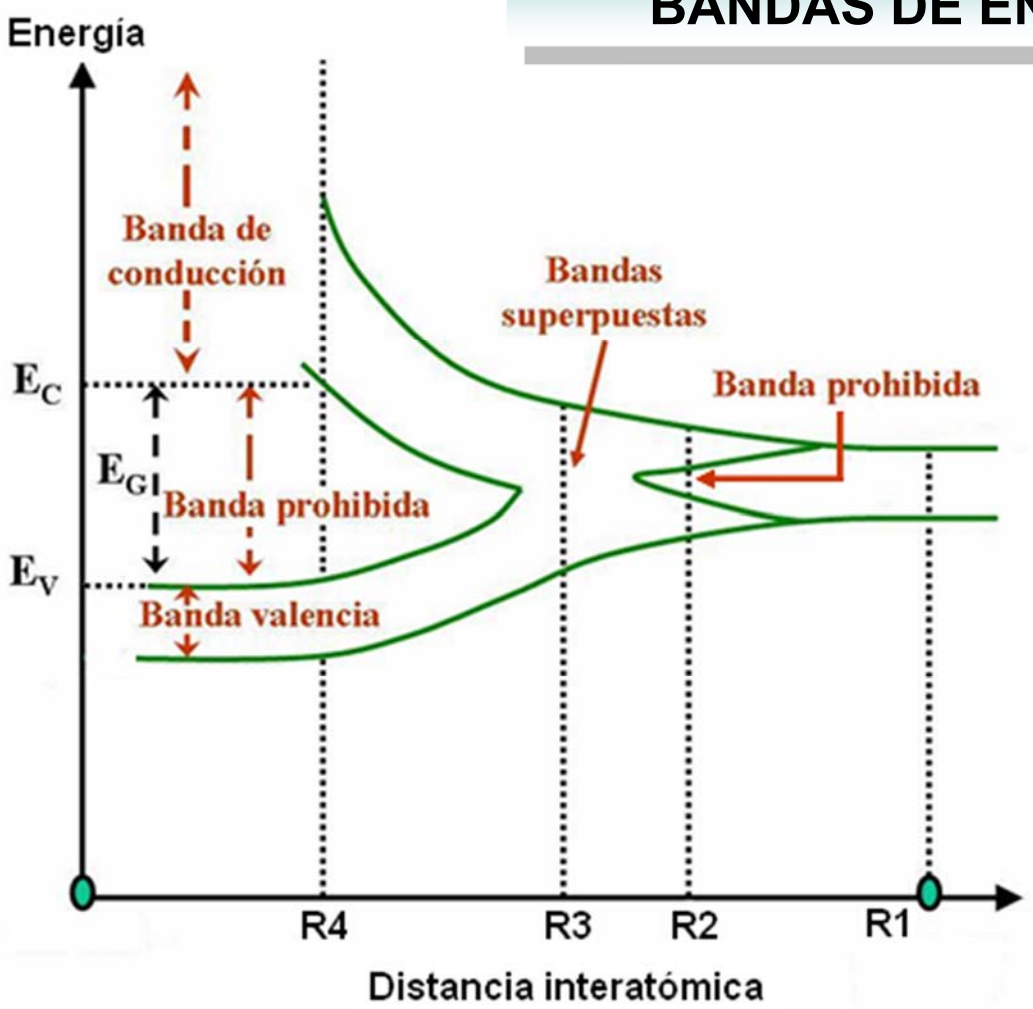
Comparación de los niveles de energía atómicos y las bandas de energía en una red



Open Course Ware

Peula, J.M., Alados, I., Liger, E., Vargas, J.M. (2014) Fundamentos Físicos de la Informática.
OCW-Universidad de Málaga. http://ocw.uma.es.
Bajo licencia Creative Commons Attribution-Non-Comercial-ShareAlike 3.0

BANDAS DE ENERGÍA



► Al conjunto de niveles de energía que contienen electrones se llama *banda de valencia (BV)*.

► La banda permitida de energía más baja en la que existen estados no ocupados es la *banda de conducción (BC).*

► Entre las dos bandas existe un conjunto de valores prohibidos para la energía que forman la *banda prohibida (BP).* La anchura de esta banda = E_G

► Los electrones que pueden tomar parte en la conducción ocupan las bandas de energía más elevadas dentro de la banda de valencia.

► La ocupación o no ocupación de la banda de conducción por electrones y la magnitud de E_G determinan del comportamiento conductor o aislante del cristal.

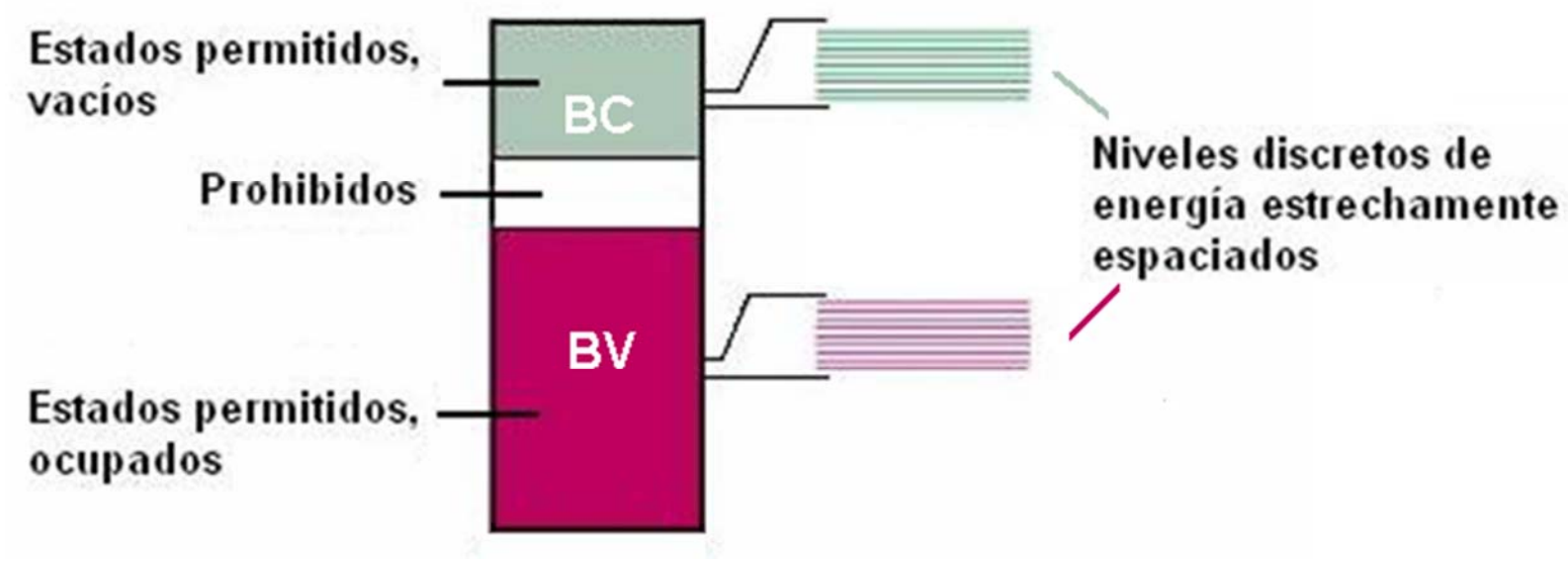
Open Course Ware

Peula, J.M., Alados, I., Liger, E., Vargas, J.M. (2014) Fundamentos Físicos de la Informática.
OCW-Universidad de Málaga. http://ocw.uma.es.
Bajo licencia Creative Commons Attribution-Non-Comercial-ShareAlike 3.0

BANDAS DE ENERGÍA

Toda clase de sólidos, independientemente de su tipo de enlace, se caracteriza porque sus estados electrónicos se agrupan en *bandas de energía.*

La estructura de bandas de energía depende de la orientación relativa de los átomos entre sí, es decir, de la estructura del cristal y del número atómico. La Mecánica Cuántica proporciona la solución a la estructura de bandas de un cristal.



Las bandas pueden estar muy separadas en su energía, pueden estar muy próximas, e incluso solaparse, según el tipo de átomos y el tipo de enlace en el sólido.

Open Course Ware

Peula, J.M., Alados, I., Liger, E., Vargas, J.M. (2014) Fundamentos Físicos de la Informática.
OCW-Universidad de Málaga. http://ocw.uma.es.
Bajo licencia Creative Commons Attribution-Non-Comercial-ShareAlike 3.0

3.1. Energía de Fermi

Al estudiar un gas de electrones debe aplicarse la estadística de Fermi-Dirac que afirma que la probabilidad de encontrar un electrón en un estado de energía E está dada por lo que se denomina *función de distribución de Fermi-Dirac f(E):*

$$f(E) = \frac{1}{1 + e^{(E - E_F)/k_B T}}$$

k_B es la constante de Boltzmann (eV/K)

T es la temperatura absoluta (K)

E_F es la energía del nivel de Fermi o energía característica del cristal (eV). Representa un nivel de energía de referencia

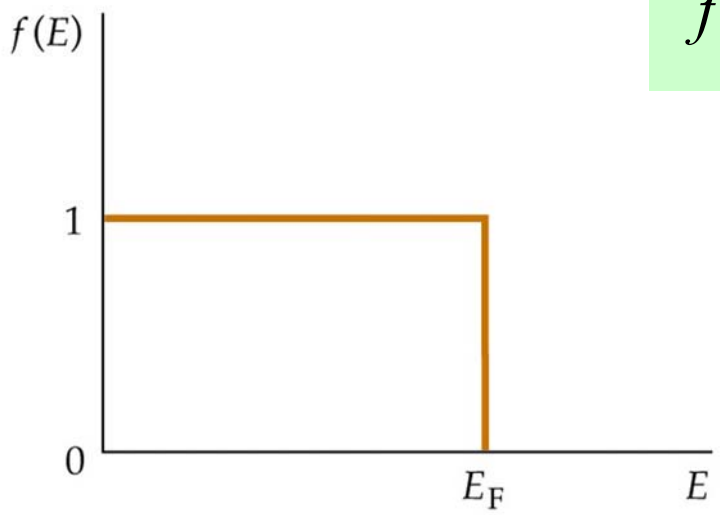
De acuerdo con esa expresión la probabilidad de encontrar un electrón con una energía E_F es (independientemente de T):

$$f(E) = \frac{1}{1 + e^{(E_F - E_F)/k_B T}} = \frac{1}{2}$$

para T = 0 K

$$f(E) = 1, \quad E < E_F$$

$$f(E) = 0, \quad E > E_F$$

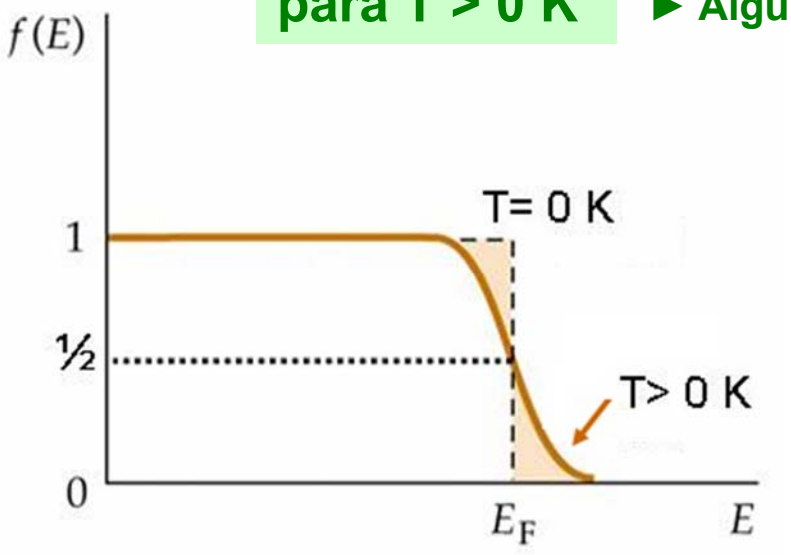


Para T= 0 K, todos los estados por debajo de E_F están completos, mientras que todos aquellos por encima de esa energía están vacíos

Open Course Ware

Peula, J.M., Alados, I., Liger, E., Vargas, J.M. (2014) Fundamentos Físicos de la Informática.
OCW-Universidad de Málaga. http://ocw.uma.es.
Bajo licencia Creative Commons Attribution-Non-Comercial-ShareAlike 3.0

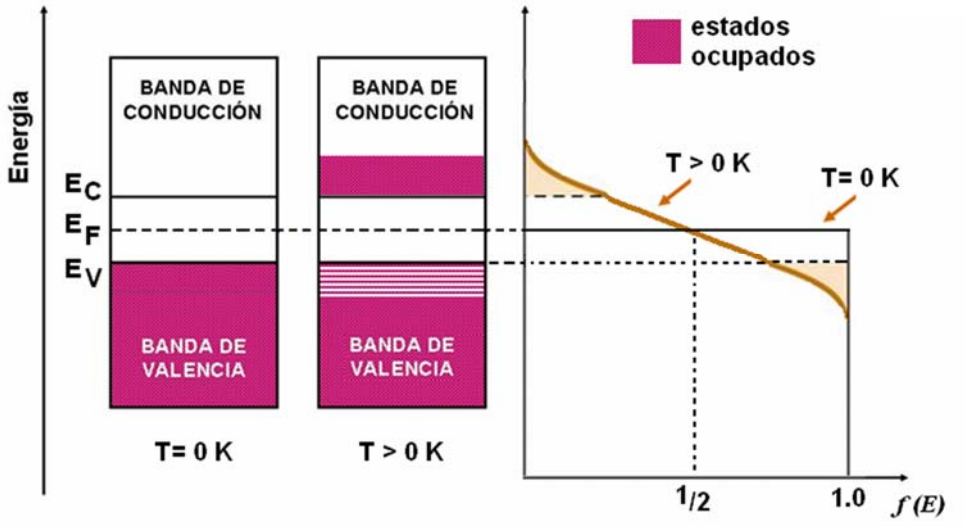
para T > 0 K ► **Algunos electrones ocuparán estados con energía superior a E_F**



***Energía de Fermi, E_F*, es el valor de energía para el cual la función de distribución vale ½**

***Nivel de Fermi*, es el nivel más alto de energía ocupado por un electrón (como máximo dos electrones en cada nivel energético)**

Determina las propiedades de conducción de un material



Relación entre el esquema de bandas de energía, BV y BC, en un sólido y la probabilidad de encontrar un electrón con una determinada energía.

Open Course Ware

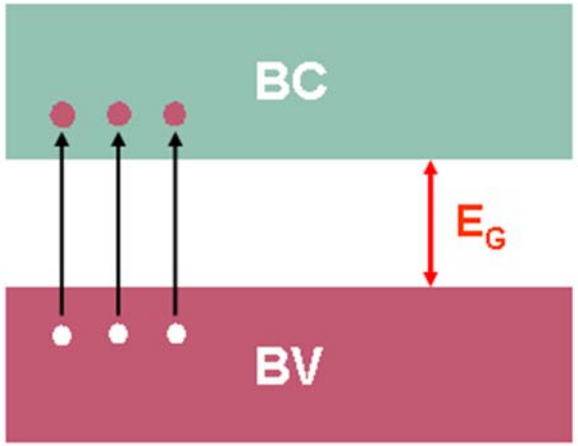
Peula, J.M., Alados, I., Liger, E., Vargas, J.M. (2014) Fundamentos Físicos de la Informática.
OCW-Universidad de Málaga. http://ocw.uma.es.
Bajo licencia Creative Commons Attribution-Non-Comercial-ShareAlike 3.0

Mecanismos de conducción eléctrica

Conducción eléctrica
↓
Campo eléctrico externo

→ **Los e⁻ deben ganar energía y situarse en estados energéticos superiores** → Sólo los **e⁻** que posean **estados energéticos superiores** próximos disponibles **vacíos y permitidos** responderán a la acción de un campo eléctrico externo

Sólo las bandas de energía parcialmente llenas pueden dar lugar a una corriente eléctrica bajo la acción de un campo eléctrico externo



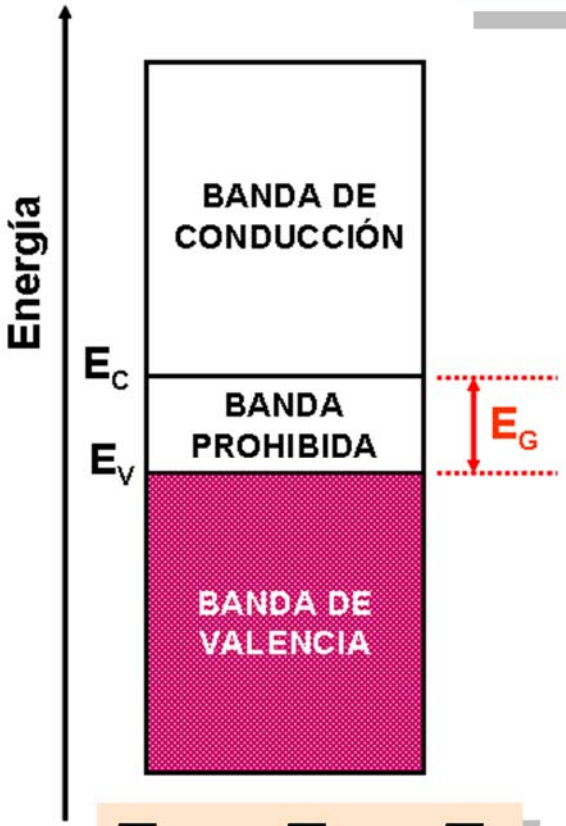
Un electrón en la banda de valencia puede adquirir suficiente energía como para convertirse en un electrón libre que contribuya a la conducción eléctrica. Se dice entonces que ese electrón tiene su energía en la banda de conducción.

Los ***e⁻*** que participan en el proceso de la **conducción eléctrica** son los que se encuentran en la **banda de conducción**

Open Course Ware

Peula, J.M., Alados, I., Liger, E., Vargas, J.M. (2014) Fundamentos Físicos de la Informática.
OCW-Universidad de Málaga. http://ocw.uma.es.
Bajo licencia Creative Commons Attribution-Non-Comercial-ShareAlike 3.0

Mecanismos de conducción eléctrica



$$E_G = E_C - E_V$$

Campo eléctrico externo

Temperatura

Energía Térmica

$$U = k_B T$$

k_B es la constante de Boltzmann

Teniendo en cuenta la energía térmica, un material en el cero absoluto (0 K) tiene todos sus electrones ocupando los niveles más bajos de energía.

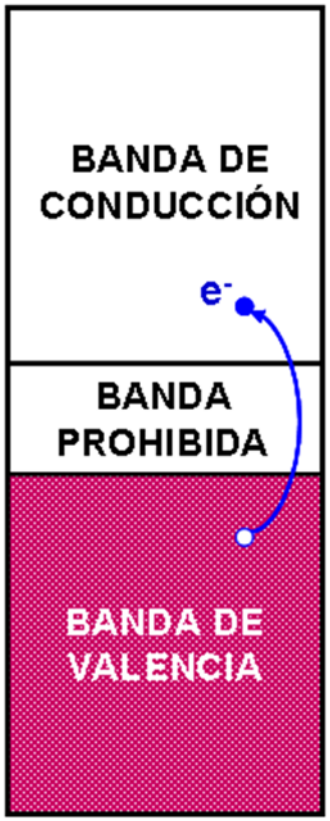
T > 0 K → **La probabilidad de salto de los e^- de BV a BC será directamente proporcional a la Tª e inversamente proporcional a E_G**

Cuando a un material se le proporciona la suficiente energía para que sus electrones de valencia "salten" a la banda de conducción, se está aumentando el número de electrones libres y, por tanto, la conductividad del material.

Open Course Ware

Peula, J.M., Alados, I., Liger, E., Vargas, J.M. (2014) Fundamentos Físicos de la Informática.
OCW-Universidad de Málaga. http://ocw.uma.es.
Bajo licencia Creative Commons Attribution-Non-Comercial-ShareAlike 3.0

Mecanismos de conducción eléctrica



- Un electrón que salta de la banda de valencia a la de conducción, deja un **nivel de energía vacío** en la banda de valencia
- Este nivel de energía se denomina **HUECO** y se comporta como si se tratase de una **partícula con carga positiva e^+**
- **Un hueco no es una partícula positiva**
- Cuando aumenta el número de electrones en la banda de conducción se dice que aumenta la densidad o concentración ***n*** de **portadores de carga negativa**
- Cuando aumenta el número de huecos en un material se dice que aumenta la densidad o concentración ***p*** de **portadores de carga positiva**

Podemos identificar dos procesos que pueden ocurrir en un material:

- ► ***Generación de pares electrón-hueco***
- ► ***Recombinación***

El movimiento de los huecos produce una corriente de cargas de signo positivo de la misma forma que el movimiento de los electrones libres produce una corriente de cargas negativas

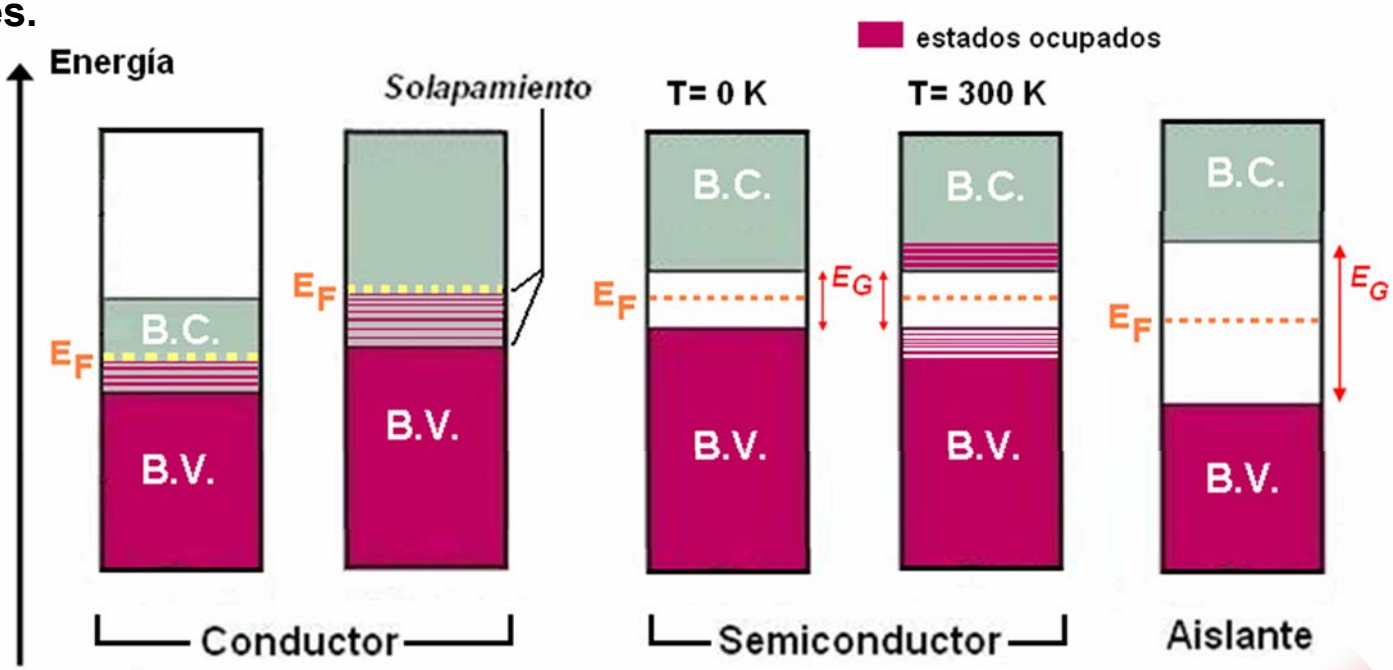
Open Course Ware

Peula, J.M., Alados, I., Liger, E., Vargas, J.M. (2014) Fundamentos Físicos de la Informática.
OCW-Universidad de Málaga. http://ocw.uma.es.
Bajo licencia Creative Commons Attribution-Non-Comercial-ShareAlike 3.0

Conductores, semiconductores y aislantes

Estructura de bandas y nivel de Fermi

La estructura de bandas energéticas de los electrones de un cristal permite explicar las diferencias entre las conductividades eléctricas y térmicas de los conductores, los semiconductores y los aislantes.



La energía del nivel de Fermi determina las propiedades de conducción de un material

- **BV parcialmente llena**

- **BV llena**
- **E_G pequeña (~ 1 eV)**

- **BV llena**
- **E_G grande (~ 10 eV)**

Open Course Ware

Peula, J.M., Alados, I., Liger, E., Vargas, J.M. (2014) Fundamentos Físicos de la Informática.
OCW-Universidad de Málaga. http://ocw.uma.es.
Bajo licencia Creative Commons Attribution-Non-Comercial-ShareAlike 3.0

Ejemplo de bandas de energía de un material conductor

Sodio (Na, Z= 11)

$1s^2\ 2s^2p^6\ 3s^1$

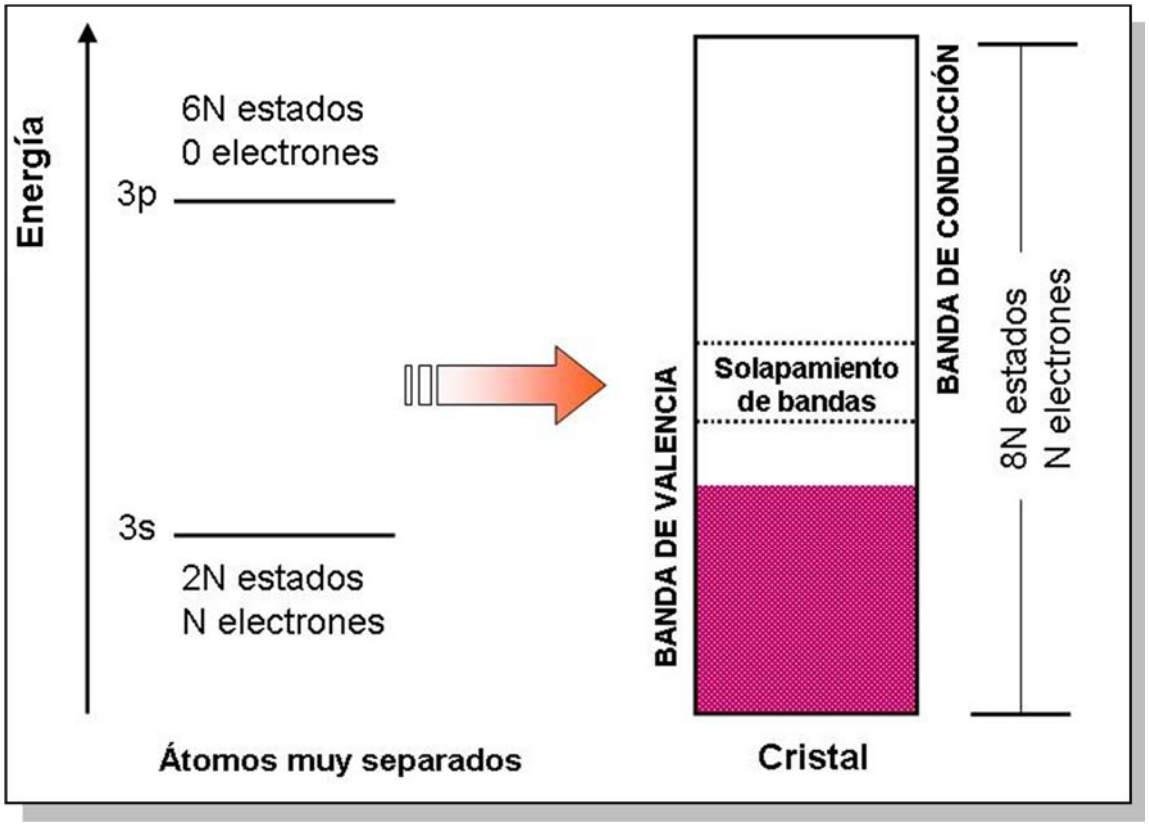
- Banda 3s parcialmente llena
- Esta banda constituye una banda de conducción

Magnesio (Mg, Z= 12)

$1s^2\ 2s^2p^6\ 3s^2$

- Última banda con electrones llena
- Sin embargo, el Mg es un buen conductor

- Hibridación de las bandas 3s y 3p para formar una única banda 3s3p con 8N estados energéticos.
- Esto ocurre tanto en el Na como en el Mg.
- **Ambos son buenos conductores**



Open Course Ware

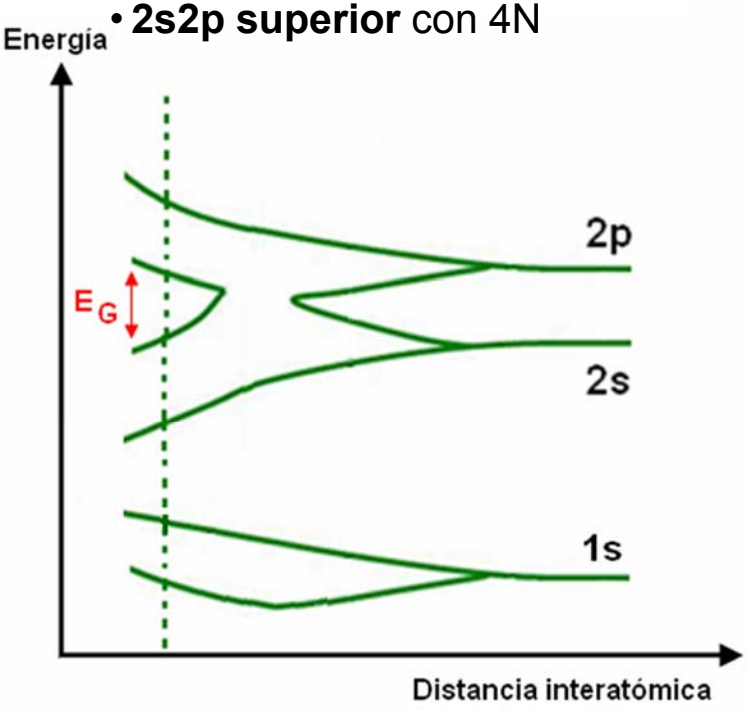
Peula, J.M., Alados, I., Liger, E., Vargas, J.M. (2014) Fundamentos Físicos de la Informática.
OCW-Universidad de Málaga. http://ocw.uma.es.
Bajo licencia Creative Commons Attribution-Non-Comercial-ShareAlike 3.0

Ejemplo de bandas de energía de un material aislante

Diamante (C, Z=6)

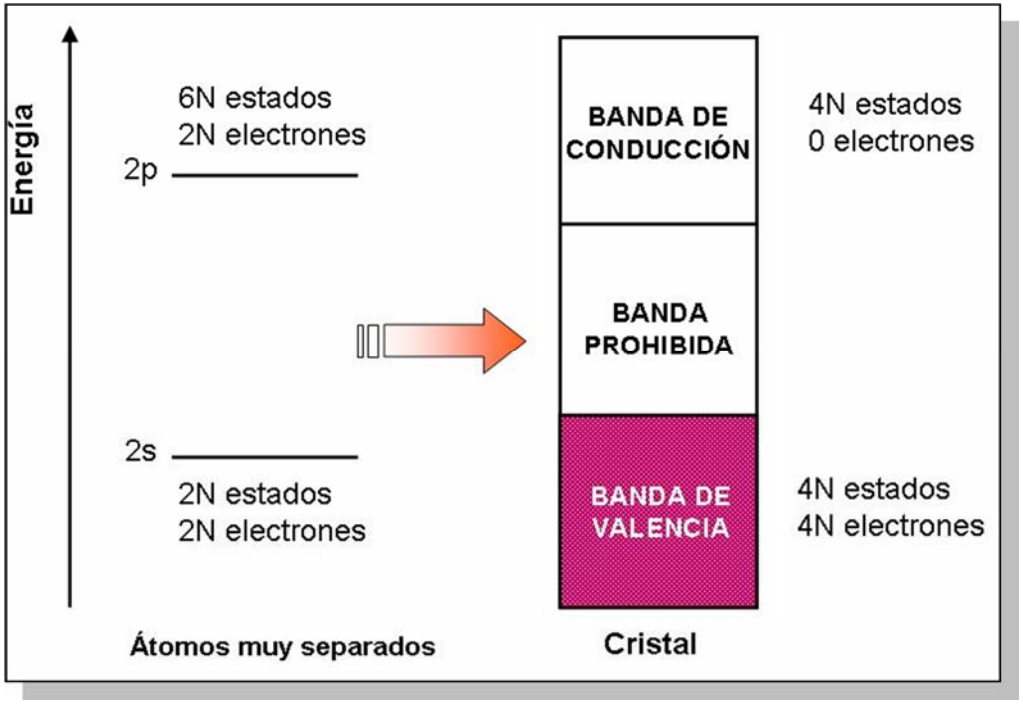
$1s^2\ 2s^2p^2$

- Banda **híbrida 2s2p** con 8N estados
- Separación de esta banda en dos
  - **2s2p inferior** con 4N
  - **2s2p superior** con 4N



Se puede esperar que el **carbono** sea un buen **conductor**

Sin embargo, **el diamante** (carbono cristalizado) es un **aislante** excelente

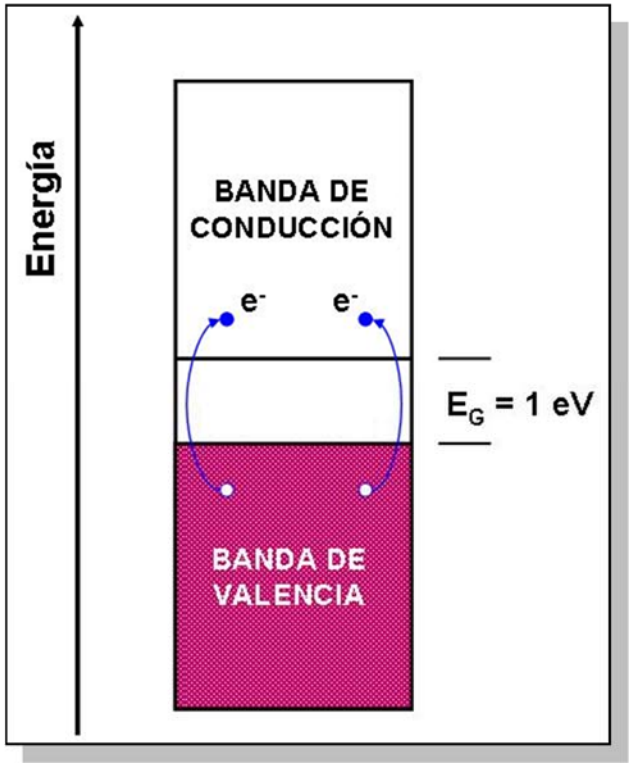


Open Course Ware

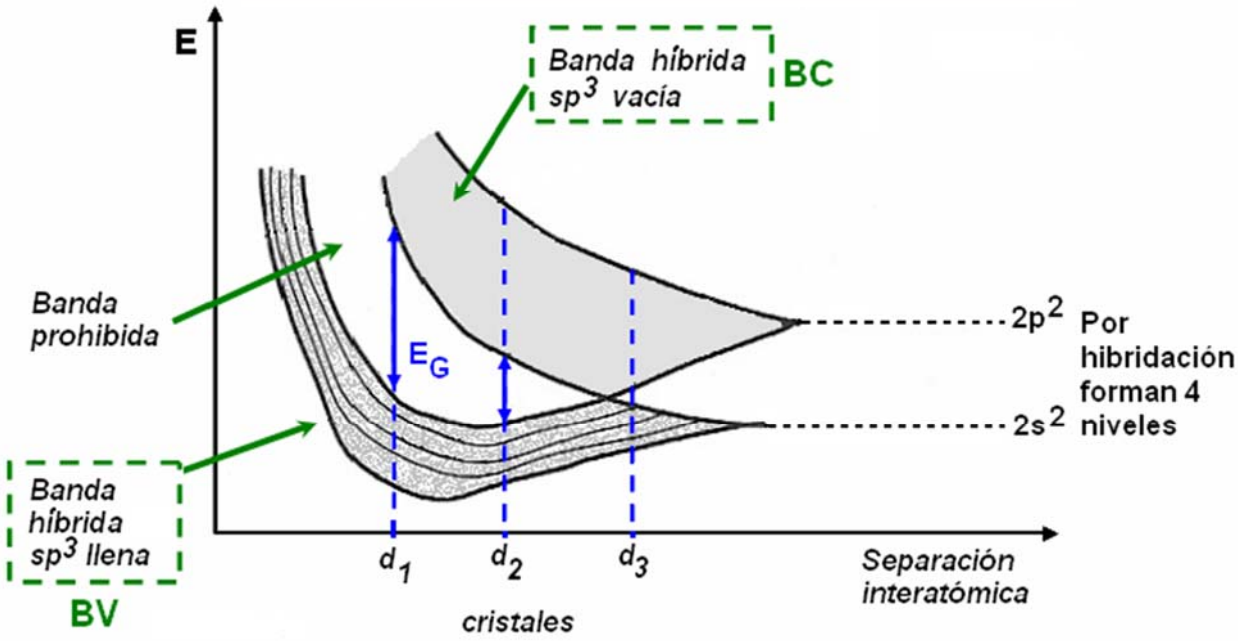
Peula, J.M., Alados, I., Liger, E., Vargas, J.M. (2014) Fundamentos Físicos de la Informática.
OCW-Universidad de Málaga. http://ocw.uma.es.
Bajo licencia Creative Commons Attribution-Non-Comercial-ShareAlike 3.0

Ejemplo de bandas de energía de un material semiconductor

- d_1 = Diamante (E_G ~ 10 eV), **AISLANTE**
- **d_2 = Silicio y Germanio (E_G ~ 1 eV), SEMICONDUCTORES**
- d_3 = Grafito (E_G ~ 0), **CONDUCTOR**



Configuración de bandas aproximada de los elementos del Grupo IV



► **Los semiconductores son aislantes a bajas temperaturas porque la banda de conducción se encuentra vacía**

► **Al aumentar la temperatura, aparecen estados ocupados en la banda de conducción**

Open Course Ware

Peula, J.M., Alados, I., Liger, E., Vargas, J.M. (2014) Fundamentos Físicos de la Informática.
OCW-Universidad de Málaga. http://ocw.uma.es.
Bajo licencia Creative Commons Attribution-Non-Comercial-ShareAlike 3.0

CONDUCTORES, SEMICONDUCTORES Y AISLANTES

		σ $(\Omega \cdot m)^{-1}$
Conductores	Li, Na, Cs, Cu, Ag, Au, etc.	10^{8}
Semiconductores	Si, Ge, AsGa, Si(P), Si(B), AsGa(Se), AsGa(Be), etc.	10^{4} - 10^{-8}
Aislantes	Mica, ámbar, cuarzo, plásticos, diamante, etc	10^{-14}

	CONDUCTORES	SEMICONDUCTORES	AILANTES
Conductividad $(\Omega\ m)^{-1}$	$> 10^{4}$	10^{-8} - 10^{4}	$< 10^{-8}$
☞ T	Disminuye	Aumenta	Aumenta
☞ impurezas	Decrece	Crece	---
Densidad e^{-} libres (n)	Apenas varía	Varía mucho (exponencial)	---

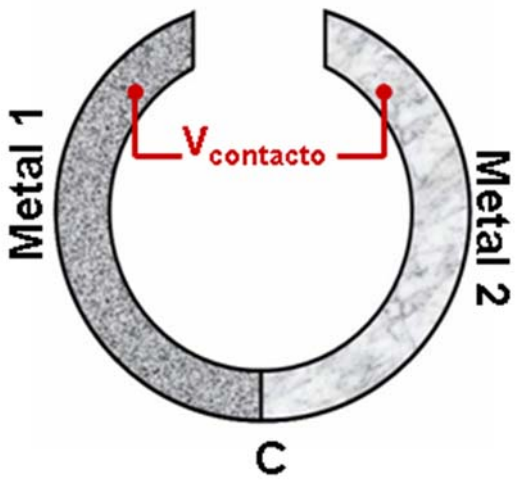
- ► Modelo clásico del electrón libre: Modelo de Drude-Lorentz
- ► Modelo cuántico del electrón libre: Modelo de Sommerfeld
- ► Modelo cuántico del electrón ligado: Modelo de Bloch

Open Course Ware

Peula, J.M., Alados, I., Liger, E., Vargas, J.M. (2014) Fundamentos Físicos de la Informática.
OCW-Universidad de Málaga. http://ocw.uma.es.
Bajo licencia Creative Commons Attribution-Non-Comercial-ShareAlike 3.0

4.2. Potencial de contacto entre dos metales

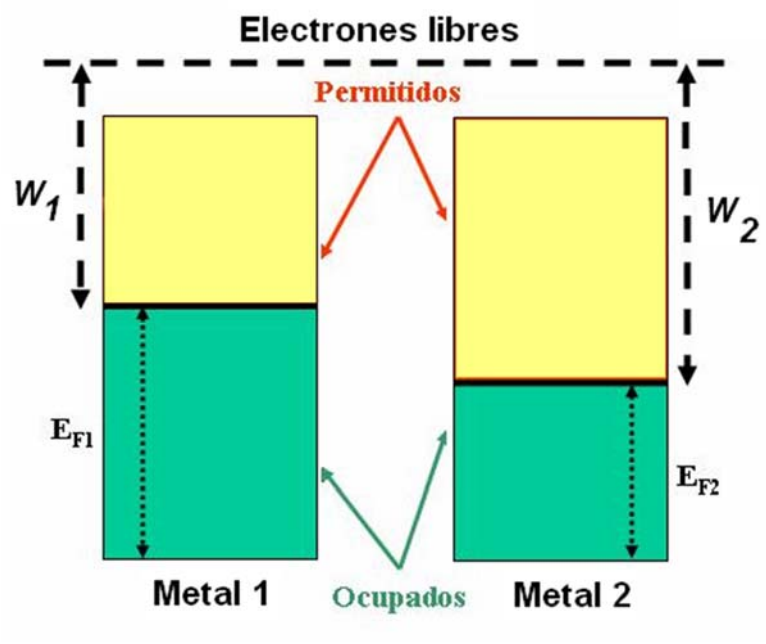
Potencial de contacto, $V_{contacto}$: Es la diferencia de potencial que se produce entre dos dos metales distintos que se ponen en contacto.

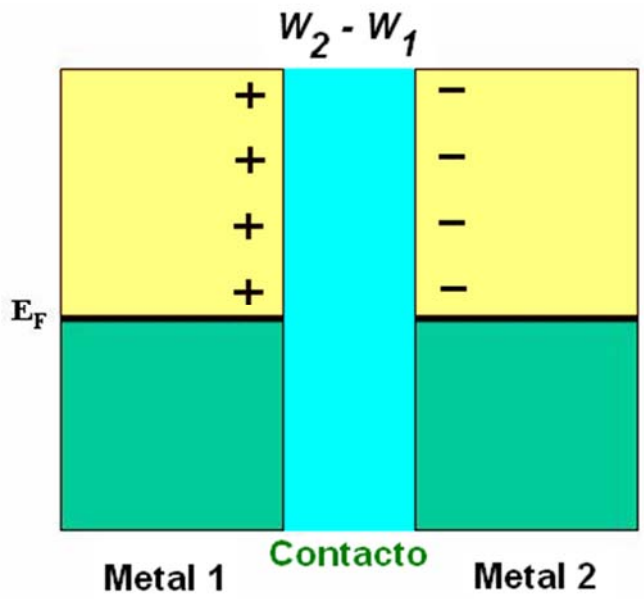


Depende de la funciones trabajo de los metales (W_1 y W_2) y de las respectivas energías de Fermi.

$$V_1 - V_2 = V_{contacto} = \frac{W_2 - W_1}{e}$$

El metal con menor función de trabajo se carga positivamente y el de mayor función de trabajo se carga negativamente.



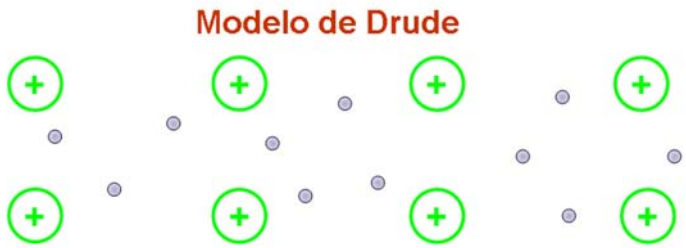


Open Course Ware

Peula, J.M., Alados, I., Liger, E., Vargas, J.M. (2014) Fundamentos Físicos de la Informática.
OCW-Universidad de Málaga. http://ocw.uma.es.
Bajo licencia Creative Commons Attribution-Non-Comercial-ShareAlike 3.0

Modelo Clásico: Gas de electrones libres

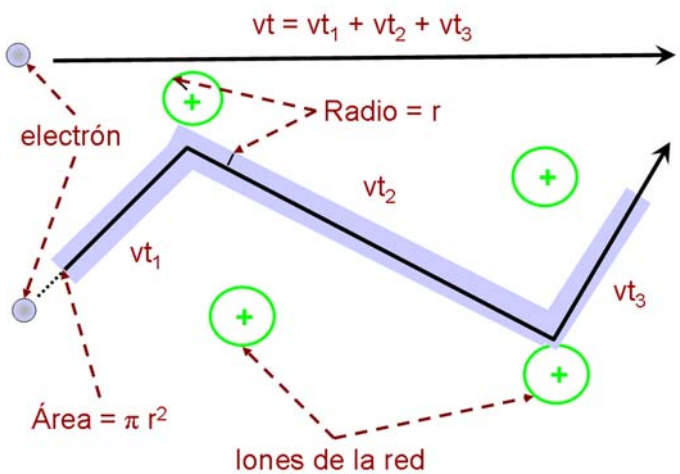
(Drude, ≈ 1900)



- ► Los electrones de valencia de un metal forman un "gas de electrones libres"
- ► El gas de electrones se distribuye uniformemente por el cristal metálico. Movimiento de electrones relativamente libres
- ► En ausencia de un voltaje, los electrones se mueven aleatoriamente. Los electrones colisionan con los iones de la red
- ► Distribución de energía de los electrones es la de Maxwell-Boltzmann

Función de distribución de Maxwell-Boltzman

$$f_{MB}(E) \approx e^{-E/k_B T}$$



Agitación térmica del gas de electrones clásico

$$E_c = \frac{3}{2} k_B T$$

La velocidad térmica

$$v_T = \sqrt{\frac{3k_B T}{m_e}} = [300\text{K}] \approx 10^5 \text{m/s}$$

Recorrido libre medio = λ

Tiempo de colisión = τ

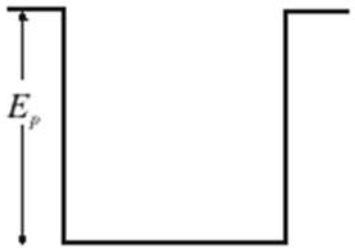
$$v = \frac{\lambda}{\tau}$$

Open Course Ware

Peula, J.M., Alados, I., Liger, E., Vargas, J.M. (2014) Fundamentos Físicos de la Informática.
OCW-Universidad de Málaga. http://ocw.uma.es.
Bajo licencia Creative Commons Attribution-Non-Comercial-ShareAlike 3.0

Modelo cuántico del electrón libre (Sommerfeld)

- **Hipótesis del sólido** similar al modelo de Drude.
- Los electrones deben ser considerados como entes **cuánticos** (Los electrones de conducción están caracterizados por **cuatro números cuánticos**).
- Los electrones obedecen al **principio de exclusión** de Pauli.
- El conjunto de electrones es un **gas cuántico (gas de Fermi)**



Modelo monodimensional de la E_p de los e^- en el interior del conductor.

$$E_n = \frac{h^2}{8mL^2} n^2$$

$$\Psi_n(x) = \sqrt{2/L}\ \text{sen}\ \frac{n\pi x}{L}$$

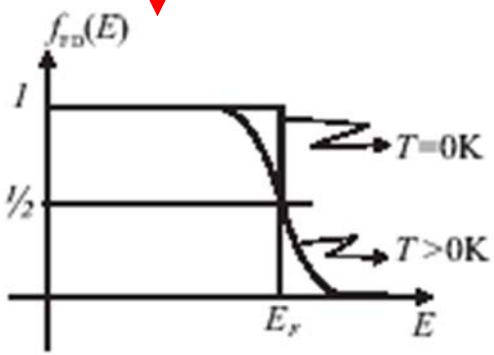
$$dN = g(E)\, f(E)\, dE$$

Función de densidad de estados

Función de distribución de Fermi-Dirac

FACTOR DE FERMI.

$$f_{FD}(E) = \frac{1}{e^{(E-E_F)/k_B T} + 1}$$



ENERGÍA DE FERMI.
La **energía** del **último nivel lleno** (o medio lleno) a T = 0

NIVEL DE FERMI.
El **nivel más alto** de energía **ocupado** por un electrón (como máximo dos electrones en cada nivel energético)
Determina las **propiedades de conducción** de un material

$$E_F = \left(\frac{N}{2}\right)^2 \frac{h^2}{8m_e L^2} = \frac{h^2}{32m_e}\left(\frac{N}{L}\right)^2$$

unidimensional

$$E_F = \frac{h^2}{2m_e}(3N/8\pi V)^{2/3} = \frac{h^2}{2m_e}(3n/8\pi)^{2/3}$$

tridimensional

$$E_m = \frac{3}{5}E_F$$

Open Course Ware

Peula, J.M., Alados, I., Liger, E., Vargas, J.M. (2014) Fundamentos Físicos de la Informática.
OCW-Universidad de Málaga. http://ocw.uma.es.
Bajo licencia Creative Commons Attribution-Non-Comercial-ShareAlike 3.0

Modelo Cuántico: Gas cuántico o de Fermi

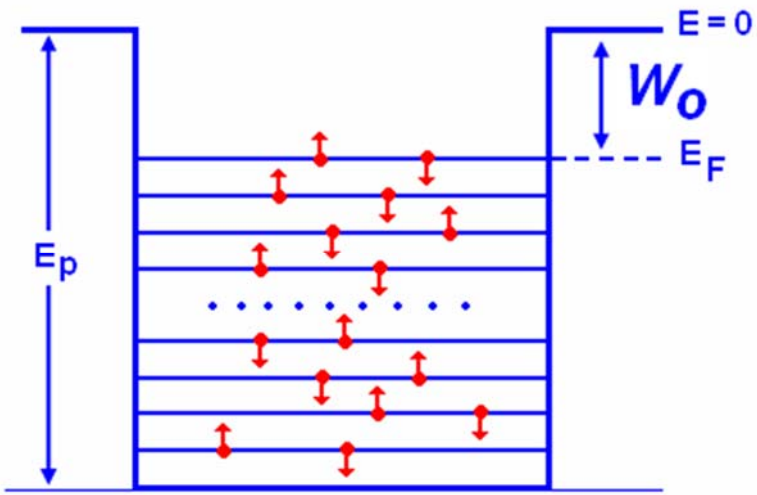
(Sommerfeld, ≈ 1927)

Gas de electrones de Fermi: **Electrones libres en un metal que obedecen a la distribución de energía cuántica de Fermi-Dirac y al principio de exclusión de Pauli**

► Los electrones son fermiones, partículas cuánticas de spin semientero, obedecen los principios de Pauli y de Heisenberg. Las energías de los componentes de este gas están cuantizadas

► Los electrones de conducción son "libres" (no interaccionan con la red) e "independientes" (no interaccionan con el resto de los electrones de conducción). El movimiento del electrón conlleva la propagación de una onda material

► La distribución de energías entre los electrones que componen el gas electrónico no obedece la estadística de Maxwell-Boltzmann, sino la de Fermi-Dirac



El estudio del *gas de Fermi* se hace en dos etapas:

a) Determinación de los posibles estados energéticos cuantizados de los electrones

b) Probabilidad de que sean ocupados estos estados utilizando la *distribución de Fermi-Dirac.*

Open Course Ware

Peula, J.M., Alados, I., Liger, E., Vargas, J.M. (2014) Fundamentos Físicos de la Informática.
OCW-Universidad de Málaga. http://ocw.uma.es.
Bajo licencia Creative Commons Attribution-Non-Comercial-ShareAlike 3.0

Modelo cuántico de la conducción eléctrica

$$\sigma = \frac{ne^2\lambda}{m_e v_F}$$

- Todos los electrones contribuyen a la conducción
- La dinámica de los electrones sometidos a un campo externo (colisiones) debe venir dado a través de la **dispersión de la onda electrónica** por los iones, es decir, la **reflexión de la onda electrónica** en su interacción con la red cristalina
- En un cristal perfecto no hay dispersión. La función de onda del electrón se acopla a la periodicidad de la red. El **recorrido libre medio**, τ, será del orden de las dimesiones del cristal. Esto implica una conductividad infinita.
- La dispersión proviene de las **desviaciones de la periodicidad** de la red cristalina

$$\sigma = \sigma_i + \sigma_T$$

- **Presencia de impurezas**
- **Agitación térmica de los iones**

$$\lambda \propto T^{-1} \qquad \sigma \propto T^{-1}$$

- **Explica el diferente comportamiento térmico y eléctrico de los electrones**
- **Conduce a la correcta dependencia de la conductividad con la temperatura**

- **No explica el diferente comportamiento de conductores y semiconductores con respecto a la temperatura**
- **No explica la gran dependencia de las propiedades de la conducción en semiconductores con respecto a las impurezas añadidas**
- **No explica la aparente presencia de cargas positivas como portadores de carga en algunos metales**

Open Course Ware

Peula, J.M., Alados, I., Liger, E., Vargas, J.M. (2014) Fundamentos Físicos de la Informática.
OCW-Universidad de Málaga. http://ocw.uma.es.
Bajo licencia Creative Commons Attribution-Non-Comercial-ShareAlike 3.0