

Universidad Nacional de La Plata  
Facultad de Ciencias Exactas  
Departamento de Física



Tesis de Maestría  
Maestría en Física Contemporánea

**Estrategia basada en  
Tecnologías de la Información y la Comunicación  
para la enseñanza de modelos microscópicos  
de conducción en el nivel superior no universitario.**

Tesista: Prof. Carlos Gabriel Dibarbora  
Director de Tesis: Dr. Sergio Sciutto  
La Plata, Noviembre de 2017

Agradezco a Aye por su apoyo incondicional, a mi hermana Andrea, y a mi papá Carlos. A mis compañeros de cursada Agustín, Gabriel, y Paola y a todos los docentes de la maestría que tanto nos dieron, aunque especialmente al Dr. Sergio Sciutto y al Dr. Carlos García Canal que además de su ayuda invaluable con este trabajo, se ocuparon de que pudiera viajar al ICTP a estudiar y expandir mis fronteras.

Por último agradezco a todos mis docentes de física desde la escuela hasta el profesorado que me comunicaron y contagiaron el amor por esta ciencia y su enseñanza, desde siempre: Juan Manuel, Martín, Guillermo, Agustín, Marcelo, Marcela, Aldo y Rafael.

## Resumen

El presente trabajo plantea la elaboración de estrategias de enseñanza, que se encuadran en las denominadas *estrategias basadas en el alumno*, para el caso de teorías de la conducción eléctrica en materiales, abarcando los conceptos de teoría de bandas y semiconductores, y utilizando simulaciones, cálculos numéricos, y otros recursos tecnológicos para comparar diferentes modelos microscópicos de conducción y lograr el aprendizaje de los tópicos correspondientes.

La experiencia se puso en práctica en un curso de la asignatura Física Contemporánea II, perteneciente al 3° año del profesorado de Física del Instituto Nacional Superior del Profesorado Técnico (INSPT-UTN) y se analizó la efectividad de los diferentes instrumentos diseñados especialmente para esta actividad. El trabajo describe los conceptos involucrados con una profundidad adecuada para el nivel superior no universitario, define las herramientas utilizadas, presenta el código de los programas construidos en Scilab, narra la puesta en práctica de las estrategias y realiza un análisis de las dificultades y aciertos encontrados durante la misma.

## Índice

Introducción .....	6
Ámbito de aplicación.....	8
Metodología .....	9
Cap 1. Física del estado sólido.....	10
Mecánica estadística clásica.....	11
Conducción eléctrica. Modelo de Drude.....	12
Perspectiva clásica. ....	14
Alcances de la estadística Clásica .....	22
La mecánica cuántica. ....	23
Pozo cuadrado de potencial infinito .....	25
El principio de exclusión de Pauli.....	28
Distribución de Fermi-Dirac.....	30
Teoría de bandas. Otros materiales.....	37
Semiconductores .....	42
Cap 2. Enseñanza de la Física .....	46
Aprendizaje Activo. ....	46
ISLE .....	48
El proceso de modelado. ....	51
Incorporación de la tecnología .....	52
Cap. 3. Simulaciones, scripts, y programas. ....	55
Movimiento Browniano .....	56
Modelo de Drude clásico.....	57
Estadística de Fermi-Dirac .....	59
Modelo de Einstein de un sólido. ....	60

Mecánica Cuántica – Ecuación de Schrödinger .....	60
Semiconductores dopados .....	66
Cap. 4. Secuencia didáctica con los estudiantes – Desarrollo y evaluación. ....	67
Resultados del pre-test .....	68
Desarrollo de la propuesta. ....	69
Aprendizaje activo y socialización de propuestas. ....	71
Experimentos en computadora .....	73
Conducción clásica y modelo de Drude. ....	75
Mecánica cuántica .....	78
Estadística de Fermi-Dirac .....	80
Metales - Modelo de Fermi .....	83
Otros materiales. ....	88
Resultados .....	93
Conclusiones.....	95
Bibliografía.....	97
Anexo 1 – Actividades entregadas a los estudiantes.....	101
Anexo 2. Código de programación. ....	107
Movimiento Browniano .....	107
Modelo de Drude.....	108
Modelo Mecánico Cuántico. Fermi-Dirac .....	109
Modelo Mecánico Cuántico. Resolución de la Ecuación de Schrödinger .....	111

## Introducción

El presente trabajo plantea la elaboración de estrategias de enseñanza, que se encuadran en las denominadas *estrategias basadas en el alumno*, para el caso de la teoría de la conducción eléctrica en materiales. Este tema abarca los conceptos de teoría de bandas y semiconductores, y se utilizan simulaciones, cálculos numéricos, y otros recursos tecnológicos para comparar diferentes modelos microscópicos de conducción y lograr el aprendizaje de los tópicos correspondientes.

El objetivo principal es crear estrategias y recursos didácticos basados en la utilización y manipulación de simulaciones físicas con variables controladas y cálculos asistidos por computadora para utilizarse en el proceso de enseñanza-aprendizaje de la Física Contemporánea en el nivel superior no universitario.

Los objetivos específicos son:

- Investigar y sistematizar los modelos físicos involucrados y las metodologías posibles para representarlos y explorarlos.
- Desarrollar productos *software* que cumplan con los requerimientos necesarios y representen los modelos trabajados.
- Gestionar las actividades para la utilización de dicho software como apoyo al proceso de enseñanza en un curso de nivel terciario.
- Evaluar el impacto del recurso y las estrategias desarrolladas en el proceso de enseñanza-aprendizaje.

Teniendo en cuenta el concepto de modelo físico y sus límites de validez se desarrolla una propuesta que explica los aspectos más significativos de los diferentes modelos de conducción eléctrica. Como objetivo último se aspira a que los estudiantes sean capaces de visualizar el funcionamiento de dispositivos conductores y aislantes, además de otros dispositivos electrónicos construidos con semiconductores como el diodo y el LED que se basan en ideas de la mecánica cuántica y (del estudio) de la materia condensada, áreas que se encuadran dentro de la denominada Física Contemporánea.

El cuerpo de conocimientos denominado "Física Contemporánea" es de interés para los futuros docentes de ciencias ya que existe un gran número de fenómenos que se

explican teniendo en cuenta sus principios, incluido el funcionamiento de varios dispositivos tecnológicos de uso diario en la actualidad. Esto quiere decir que estos conocimientos son útiles para el dictado de clases, y es importante que se aborden durante la formación inicial con la profundidad adecuada.

El capítulo 1 de este documento se dedica a la presentación del subconjunto de los contenidos de “Física Contemporánea” que se seleccionaron como unidad didáctica y marco para este trabajo.

El tratamiento de temas de Física en la mayoría de los cursos del Instituto donde se llevó a cabo el trabajo se realiza según las metodologías de enseñanza tradicional, que se basa en clases expositivas y resolución de problemas. Si bien en este tipo de clases hay lugar para la incorporación de la tecnología, para el desarrollo de esta propuesta con futuros docentes se consideró apropiado explorar otras formas de enseñanza que incorporaran a las computadoras, a fin de que los profesores en formación se vieran expuestos a un abanico de estrategias y recursos didácticos.

Los problemas que se resuelven en investigación muchas veces se solucionan a partir de la adaptación a modelos físicos conocidos, de la búsqueda de correlaciones entre variables, de la creación de nuevos modelos, y de la experimentación en el laboratorio entre otras técnicas. Esto se traduce en estrategias novedosas como la propuesta aquí, que proponen replicar o simular este tipo de actividades para llevar el mensaje de la Física a las escuelas. El capítulo 2 de este trabajo desarrolla en profundidad el marco teórico educativo que contiene las teorías de enseñanza-aprendizaje que refieren a las estrategias utilizadas en este trabajo.

Programas tales como el públicamente conocido “Programa Conectar-Igualdad” incluyen gran cantidad de software de modelado físico y matemático en las computadoras portátiles que se entregan a los alumnos y docentes de escuela media e institutos de formación docente. Por diversos factores entre los que se incluye el desconocimiento sobre estas herramientas por parte de docentes y alumnos, todavía no se utilizan esas computadoras de forma sistemática en todas las asignaturas de la escuela secundaria. Este trabajo constituye un aporte en este campo, al contribuir a la capacitación de los futuros docentes en herramientas que ya tienen a su disposición.

El trabajo realizado se orienta a acercar el uso de la computadora y de los modelos

computacionales a la enseñanza de la Física Contemporánea, según la propuesta del marco metodológico TPACK (planificación incorporando simultáneamente conocimientos de contenido, pedagógicos y tecnológicos), sobre todo en el ámbito de diferentes teorías de conducción eléctrica, clásicas y cuánticas, que devienen en los modelos de semiconductores y dispositivos electrónicos. Consecuentemente, se aspira a generar herramientas que permitan visualizar elementos de las teorías físicas actuales mediante *aprendizaje activo* basado en el alumno, buscando un mayor aprovechamiento del tiempo de clase. El capítulo 3 da cuenta de las herramientas tecnológicas desarrolladas apuntando a ese objetivo.

Por último, el capítulo 4 constituye una narrativa de la aplicación de dicha estrategia de enseñanza completa en un curso de profesorado de Física, evaluando los aprendizajes adquiridos y el cumplimiento de los objetivos por parte de los alumnos.

### **Ámbito de aplicación**

En el INSPT-UTN (Instituto Nacional Superior del Profesorado Técnico – Universidad Tecnológica Nacional) se dicta la carrera de Profesor en Disciplinas Industriales, Especialidad Física y Física Aplicada. Las incumbencias de dicha carrera son principalmente la enseñanza de la Física en la escuela media, y en institutos terciarios. Debido a la especificidad del mencionado instituto, que brinda una salida intermedia con el título de Técnico Superior en Física, se estudian Física y Matemática durante los primeros tres años del plan de estudios, constituyendo el cuarto año el ciclo de complementación de formación docente, el cual está integrado únicamente por materias que podrían encasillarse dentro del área de las ciencias sociales. Física Contemporánea aparece en los planes de estudio como una materia de 5 horas cátedra (la hora cátedra es de 40 minutos) semanales en tercer año, y posee un plan de estudio que prescribe la cobertura de gran cantidad de tópicos como Relatividad Especial, Mecánica Cuántica y Mecánica Estadística. Como consecuencia, el tiempo dedicado a cada uno de estos temas es en general insuficiente, y constituye todo el acercamiento formal que los futuros profesores tienen a los mismos durante su formación inicial.

La secuencia didáctica se realizó con 7 estudiantes de los cuales 5 estaban cursando la asignatura en cuestión y otros dos ya la habían aprobado y la estaban cursando en

calidad de oyentes.

## **Metodología**

La investigación desarrollada utilizó una metodología mixta, donde las actividades de sistematización, diseño y construcción de las simulaciones y modelos para la enseñanza fueron llevadas a cabo de forma estructurada, respetando el carácter formal de las teorías y buscando que los resultados y datos numéricos utilizados para la construcción de los modelos computacionales sean válidos, mientras que su elección y la correspondiente evaluación de su eficacia pedagógica se realizó de forma cualitativa, mediante pre-test, análisis de las producciones de los estudiantes realizadas durante la actividad, e intercambio y devoluciones escritas y orales no estructuradas con posterioridad a la actividad.

En cuanto a las herramientas tecnológicas, estas fueron desarrolladas en Scilab, basándose en trabajos publicados sobre propuestas educativas en lenguaje Matlab, y adaptaciones de propuestas de aprendizaje tradicional de libros de texto clásicos, dando origen a un conjunto de saberes que combinan los aspectos de metodología de la enseñanza de las ciencias, con los aspectos disciplinares de la Física y aspectos tecnológicos para el desarrollo y programación de las herramientas. Es decir que para lograr un correcto uso de la tecnología como recurso de enseñanza, las simulaciones y scripts (líneas de código de programación que se ejecutan directamente en el Scilab sin compilación previa) desarrollados son solo una herramienta más que debe ser acompañada con las actividades correctas que serán diseñadas buscando que los estudiantes sean capaces de realizar hipótesis, analizar y extraer conclusiones correctas sobre los temas en estudio, de forma que realicen aprendizajes sólidos y durables, y el conjunto de todas estas actividades es lo que constituye el aporte de este trabajo.

## Cap 1. Física del estado sólido.

Los objetos de estudio serán elementos del programa de la asignatura “Física Contemporánea” de la carrera del profesorado de Física del INSPT-UTN necesarios para trabajar la conducción eléctrica y dispositivos semiconductores, entre los cuales cabe destacar.

- Mecánica estadística clásica. Distribución de Maxwell - Boltzmann. Fenómenos de transporte. Conceptos de camino libre medio y velocidad media.
- Modelo de la conducción eléctrica de Drude, clásico.
- La ecuación de Schrödinger. Electrones libres y Pozo cuadrado finito de potencial.
- Mecánica estadística cuántica. Distribución de Fermi-Dirac, naturaleza de la materia. Electrones libres y “gas de fermiones”.
- Teoría de bandas. Funciones de Bloch y problema de un electrón en un potencial periódico infinito.

Este capítulo recopila las diferentes teorías y modelos que se trabajan durante la aplicación de las actividades propuestas, diferenciando los modelos conocidos por los alumnos a priori y los que los alumnos estudiaron durante la realización de las actividades que constituyen el presente trabajo.

Los modelos que se trabajan en este proyecto son sencillos y cada uno requiere contenidos puntuales del anterior para ser comprendido. Se espera que los estudiantes de profesorado realicen un proceso gradual de estudio de los mismos donde analicen su evolución y los límites de validez que presenta cada uno en un contexto determinado. Los diferentes modelos trabajados han sido mejorados con el tiempo y muchos de sus aspectos actualmente se han descartado, aunque conservan valor didáctico. Como aclara Ashcroft (Ashcroft & Mermin, 1976, pág. 2), incluso los modelos más tempranos que poseen fallas en varios aspectos, cuando son bien usados poseen un valor inmenso para los físicos del sólido.

El capítulo está escrito de tal manera que pueda servir como un apunte o texto de consulta para los alumnos futuros del profesorado que estudien este tema, por lo que

se detiene muchas veces en conceptos básicos fundamentales para el tema que pueden resultar obvios para lectores más experimentados.

Esta secuencia presenta, para los estudiantes de la asignatura Física Contemporánea, un primer acercamiento a la física del sólido y a la utilización de la computadora para resolver las situaciones matemáticas que puedan exceder sus habilidades.

### **Mecánica estadística clásica.**

Los alumnos que experimentaron esta instancia habían cursado anteriormente la asignatura Física II. En la asignatura Física II se estudia la teoría cinética de los gases, particularmente el modelo del gas ideal. En este modelo, a partir de unos pocos principios o suposiciones sobre la naturaleza de las partículas de un gas, se puede determinar el comportamiento macroscópico de un conjunto enorme de dichas partículas. La teoría, como se estudia en esta asignatura de nivel terciario, no aborda la distribución de Maxwell-Boltzmann ni el espacio de velocidades en profundidad, pero presenta la distribución y plantea cómo las velocidades moleculares dependen de la temperatura del gas. Básicamente se aboca a plantear el principio de equipartición y a obtener velocidades, energías y presiones medias. (Tipler, 1981)

Según el principio de equipartición, en un sistema en equilibrio canónico, la energía promedio de una partícula es  $\frac{1}{2}.k.T$  por cada partícula y por cada grado de libertad cuadrático. (Hermann, 2005, pág. 88)

Esto quiere decir que la energía promedio de una partícula de un gas ideal monoatómico, que solo puede desplazarse en tres dimensiones y no posee grados de libertad internos (no puede vibrar) se expresaría según la siguiente expresión:

$$\left(\frac{1}{2}mv^2\right)_{med} = \frac{3}{2}.k.T \quad (1. 1)$$

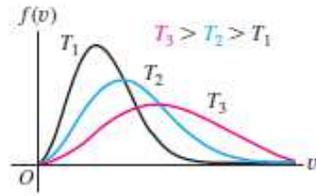


Figura 1.1 Distribución de velocidades clásicas de Maxwell Boltzmann (Giancoli, 2009, pág. 479) (Young & Freedman, 2009, pág. 630)

Las rapidezces de las partículas estarán distribuidas según la estadística de Maxwell Boltzmann:

$$f(v) = 4\pi \left( \frac{m}{2\pi \cdot kT} \right)^{3/2} v^2 e^{-m \cdot v^2 / 2kT} \quad (1.2)$$

Para obtener la rapidez media de las partículas se integra la expresión como se puede consultar en (Young & Freedman, 2009, pág. 630) y (Tipler, 1981, pág. 78), entre otros y se obtiene:

$$v_{med} = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}} \quad (1.3)$$

Para la dinámica de trabajo planteada, estas nociones de mecánica estadística clásica son suficientes, ya que el objetivo de esta propuesta es el estudio de la física más allá de las carencias matemáticas de los alumnos mediante la interpretación conceptual de los fenómenos.

Son conceptos fundamentales el de distribución de velocidades, el de teorema de equipartición, y el hecho de que a partir de propiedades mecánicas de un número N enorme de partículas microscópicas se puede predecir el comportamiento de un sistema macroscópico.

### Conducción eléctrica. Modelo de Drude

El fenómeno más importante que se aborda en este trabajo es el de la conducción de electrones en metales. Todos los libros de física universitaria consultados (Tipler,

Serway, Sears, y Resnick) abordan el tema de manera similar, a partir de explicar el movimiento de los electrones en metales tomados como arquetipo del material conductor, y le dedican en promedio dos páginas cada uno.

Ashcroft y Mermin explican la importancia de estos modelos. Dos tercios de los elementos pertenecen al estado metálico y para entender un material no metálico, primero se deben comprender los modelos del estado metálico. “Explicando por qué las bobinas de cobre conducen tan bien, uno empieza a aprender por qué la sal común no”. (Ashcroft & Mermin, 1976, pág. 2)

Incluso los modelos tempranos de conducción en metales, aunque fallan al explicar varios conceptos, tienen gran valor teórico si son usados correctamente. Estas son las razones por las cuales los libros de física general basan sus explicaciones en dichos modelos.

El movimiento de electrones se describe como un movimiento browniano superpuesto a un desplazamiento neto causado por la fuerza eléctrica en sentido opuesto al campo eléctrico que genera una fem (fuerza electromotriz).

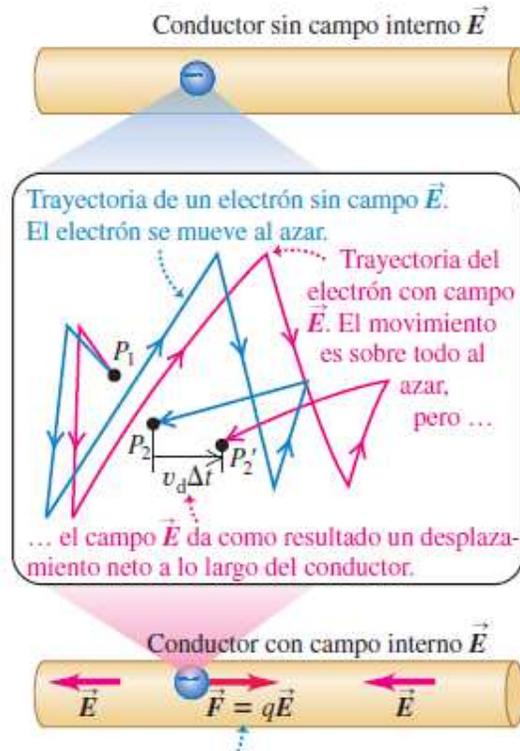


Figura 1.2 Comportamiento de un electrón en un conductor (Young & Freedman, 2009, pág. 847)

Los libros profundizan en este modelo haciendo énfasis en la velocidad de deriva, y su relación con la densidad de corriente. Se utiliza la densidad de portadores de carga libres  $n$ , aunque no se dan muchas precisiones al respecto de este concepto más allá de su definición teórica que corresponde con el número de portadores por unidad de volumen.

### Perspectiva clásica.

Los libros de texto tradicionales plantean una perspectiva que se corresponde con una versión simplificada del modelo propuesto por Drude y Thomson en 1900 (Tipler, 1981, pág. 344). Este modelo primitivo utilizaba la mecánica estadística conocida hasta el momento,

El mismo tiene su versión clásica y su versión cuántica que se postuló con posterioridad, pero fundamentalmente establece que un metal se puede modelar como una distribución tridimensional de átomos o iones con un gran número de electrones que pueden moverse libremente por todo el metal, de forma análoga a un

gas ideal en un recipiente cerrado. Los electrones mantienen su equilibrio térmico a partir de choques con los iones de la red.

Uno de los conceptos importantes a posterioridad, es el camino libre medio o recorrido libre medio. Este se define como la distancia media que una partícula recorre entre dos choques. (Tipler, 1981, pág. 83)

Esta magnitud brinda una idea de la frecuencia entre choques y depende del tamaño de las moléculas y de la densidad del gas, ya que mientras menos denso sea el mismo, es probable que las partículas de gas se encuentren a una distancia mayor de los iones de la red.

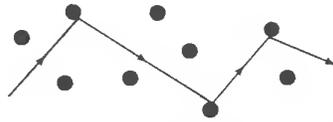


Figura 1.3 Camino libre medio de un electrón en un conductor (Ashcroft & Mermin, 1976, pág. 6)

Es importante destacar este como uno de los rasgos distintivos del modelo. Considerar el camino libre medio como la distancia interatómica, en una primera aproximación, ayuda a los alumnos a comprender el concepto y en última instancia no quita valor a los resultados positivos que esta explicación sí arroja. Posteriormente se tendrán en cuenta otros factores como la modificación de la sección eficaz con la temperatura para calcular el camino libre medio.

El tiempo promedio entre choques se llama tiempo de relajación, y los electrones al impactar contra los iones de la red, sufren un cambio brusco en su velocidad.

El modelo de Drude clásico propone que tomando un electrón cualquiera en cualquier instante, la probabilidad de que experimente un choque con un ion dentro de un infinitésimo de tiempo es  $dt/\tau$  siendo  $\tau$  el tiempo de relajación. (Ashcroft & Mermin, 1976, pág. 6), es decir que el tiempo medio desde su último choque es igual al tiempo medio hasta su próximo choque y es  $\tau$ . Esta noción estadística parece poco intuitiva, y de hecho Drude utilizó el resultado incorrecto  $\tau/2$  en su trabajo original (Tipler, 1981, pág. 347).

El principio físico que rige las interacciones según Drude, es el segundo principio de Newton, mediante el cual se puede estimar la aceleración de un electrón en la red

causado por una fuerza eléctrica externa como el producto del campo externo  $E$  y la carga del electrón  $e$  sobre la masa del electrón  $m_e$ .

$$\vec{a} = (\vec{E} \cdot e)/m_e \quad (1.4)$$

Inmediatamente después de cualquier choque, la velocidad de un electrón puede calcularse conociendo el tiempo transcurrido desde el último choque, que en este caso es el tiempo de relajación  $\tau$ , mediante la ecuación cinemática:

$$\vec{v} = \vec{v}_0 + \frac{\vec{E} \cdot e}{m_e} \cdot \tau \quad (1.5)$$

Este resultado se utiliza junto con la Ley de Ohm microscópica para encontrar una expresión que, de acuerdo a la naturaleza de los electrones en el metal, permita derivar la conductividad del metal.

En gran cantidad de libros de texto de nivel universitario como Tipler, 1981, pág. 348; Young & Freedman, 2009, pág. 849; Frish & Timoreva, 1968, pág. 141; Serway & Jewett, 2009, pág. 756 entre otros, se encuentra la ley de Ohm escrita en su forma microscópica donde aparece  $j$  como la densidad de corriente,  $E$  como el campo eléctrico externo, y la letra griega rho ( $\rho$ ) para la resistividad:

$$\vec{j} = \frac{1}{\rho} \cdot \vec{E} \quad (1.6)$$

Estos mismos textos proponen el uso de la conductividad sigma ( $\sigma$ ) como el inverso de la resistividad de forma tal que dicho parámetro es proporcional a la densidad de corriente.

La densidad de corriente, a su vez se define a partir de la densidad de portadores de carga libres  $n$ , la carga de cada uno que en el caso de los metales es la carga elemental del electrón  $e$ , y la velocidad de deriva promedio de estos portadores  $\vec{v}$ , que es la velocidad real promedio con la que se desplazan por el conductor, dejando de lado las componentes de la velocidad aleatorias en todas direcciones que se compensan en un

movimiento neto nulo y están representadas en (1. 5) como la velocidad inicial de los electrones antes de ser acelerados.

$$\vec{j} = n \cdot e \cdot \vec{v} \quad (1. 7)$$

Esta densidad de corriente tiene una relación directa con la intensidad de corriente, debido a que la misma se define a partir del flujo de la densidad de corriente a través de determinada superficie o sección:

$$i = \int \vec{j} \cdot d\vec{s} \quad (1. 8)$$

Dejando de lado la naturaleza vectorial de estas magnitudes, dado que la dirección no modifica los resultados numéricos, se utiliza la ley de Ohm en su forma microscópica (1. 6) y la componente de la rapidez de los electrones causada por el campo eléctrico presente en (1. 5) para relacionar la conductividad del material con la densidad y tipo de portadores en el material.

$$\frac{n \cdot e^2}{m_e} \cdot \tau = \sigma \quad (1. 9)$$

En (1. 9) se presenta esta expresión aunque se utiliza la letra griega sigma  $\sigma$  como la conductividad, definida como la inversa de la resistividad  $\rho$ .

Esta relación permite, en función de un dato experimental preciso como es la resistividad (en realidad, la conductividad) estimar el tiempo de relajación para los choques entre electrones.

El dato que se debe calcular para poder completar la estimación, es la densidad numérica de portadores de carga. En los metales, conductores, se encuentran uno o dos electrones de conducción por átomo, por lo que conociendo la densidad volumétrica, y la masa molar, se puede estimar la densidad numérica. La gran mayoría de los libros de texto realizan estos cálculos, como se puede ver en Serway (2009, pág. 755).

Según la tabla periódica de los elementos, la densidad líneal del cobre es  $8,92 \text{ g/cm}^3$  y la masa molar es  $63,5 \text{ g/mol}$ . Además cada mol tiene  $6,02 \cdot 10^{23}$  átomos, por lo que si cada uno de estos átomos tiene un electrón libre, se puede calcular la densidad de portadores para el cobre como  $8,46 \cdot 10^{28} \text{ m}^{-3}$  según la siguiente expresión.

$$n = \frac{8,92 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}}{63,5 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} \cdot 6,02 \cdot 10^{23} \frac{\text{electrones}}{\text{mol}} \quad (1. 10)$$

Si la resistividad de los metales es del orden de  $1,0 \cdot 10^{-8} \Omega \cdot \text{m}$  a temperatura ambiente (por ejemplo, el cobre tiene una resistividad de  $1,7 \cdot 10^{-8} \Omega \cdot \text{m}$ ) y la densidad numérica de portadores (electrones) está en el orden de la calculada, puede obtenerse un valor aproximado para el orden de los tiempos de relajación despejándolo de (1. 9) y reemplazando los valores como se ve en las siguientes expresiones:

$$\tau = \frac{9,1 \cdot 10^{-31} \text{kg}}{1,7 \cdot 10^{-8} \Omega \cdot \text{m} \cdot 8,5 \cdot 10^{28} \text{m}^{-3} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \text{C} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \text{C}} \quad (1. 11)$$

$$\tau = 2,5 \cdot 10^{-14} \text{s} \quad (1. 12)$$

Esto permite calcular por ejemplo el camino libre medio de los electrones ( $\bar{l}$ ), definido a partir del tiempo de relajación y de la rapidez media de los mismos como propone Ashcroft (Ashcroft & Mermin, 1976, pág. 9):

$$\bar{l} = v_0 \cdot \tau \quad (1. 13)$$

La rapidez media de los electrones no es un dato conocido hasta el momento en el modelo, pero en la época de Drude se estimaba bajo el supuesto de que los electrones se comportaban como un gas clásico, por lo que podía estimarse en función del principio de equipartición como se expresó en (1. 1) o más precisamente según el resultado planteado en (1. 3).

De esta manera, suponiendo una temperatura estándar de 300K, se obtiene una rapidez media de  $3,4 \cdot 10^5 \text{ m/s}$  para los electrones, que con el tiempo de relajación

calculado en (1. 12) y aplicando (1. 13) corresponde a un recorrido libre medio del orden de 8,0 nm, poco más de un orden de magnitud mayor a la distancia interatómica. Es un dato que tiene sentido, aunque no responde totalmente a la fenomenología descrita por Drude, de electrones chocando constantemente contra los iones. Se supone en este modelo que los electrones no deberían ser capaces de recorrer la distancia equivalente a la longitud de 80 átomos alineados sin chocar ni una vez, aunque este planteo responde a lo propuesto por Ashcroft & Mermin (1976, pág. 9) donde además se aclara lo rústico de esta aproximación y lo alejado de otros resultados teóricos con modelos más complejos.

La importancia de abordar este modelo en la propuesta radica en su simplicidad, que los estudiantes lo pueden seguir utilizando sus conocimientos básicos de física general y que aporta una idea clara del alcance limitado de los modelos clásicos.

Por otro lado, Tipler (Tipler, 1981, pág. 348) realiza otro planteo donde adquiere una estimación del camino libre medio en función de la sección eficaz de los átomos de cobre, suponiendo que cada átomo presenta un área efectiva para que los electrones colisionen con él y que el camino promedio que el mismo recorrerá es proporcional al inverso de la densidad numérica de iones (que en el cobre es equivalente a la de electrones) y a la sección eficaz  $\sigma$  que presenta cada átomo (Tipler, 1981, pág. 84), expresión planteada a continuación.

$$\bar{l} = \frac{1}{n \cdot \sigma} \quad (1. 14)$$

Este agregado toma como base el modelo anterior y agrega un modelo de átomos donde estos son partículas clásicas esféricas con un radio de aproximadamente 1 Angström (10 nm) con el que se calcula la sección eficaz. Se plantea sigma como el área de una circunferencia de este radio por lo que el camino libre medio de los electrones en el cobre calculado con (1. 14) sería de aproximadamente  $3,7 \cdot 10^{-10}$  m.

Este resultado es 20 veces más chico que el obtenido con el otro planteo, y es más apropiado para la fenomenología descrita por Drude. Con este resultado y la velocidad media estimada anteriormente como  $3,4 \cdot 10^5$  m/s, el tiempo de relajación obtenido

tiene un orden de magnitud de diferencia con el tiempo anterior, estando en el orden de los femtosegundos como se puede ver en a continuación.

$$\tau = \frac{\bar{l}}{v} = \frac{3,7 \cdot 10^{-10}}{3,4 \cdot 10^5 \text{ m/s}} \approx 1 \cdot 10^{-15} \text{ s} \quad (1. 15)$$

Con esta estimación del tiempo de relajación y la ecuación **(1. 9)** es posible estimar la conductividad del cobre a temperatura ambiente como  $2,4 \cdot 10^6 \text{ S/m}$ , es decir 20 veces menor que el valor de referencia.

$$\frac{n \cdot e^2}{m_e} \cdot \frac{1}{\frac{n \cdot \pi \cdot r^2}{\sqrt{\frac{8kT}{\pi m}}}} = \sigma \quad (1. 16)$$

Esta discrepancia numérica crece más, incluso a temperaturas inferiores ya que la expresión obtenida a partir de **(1. 3)**, **(1. 9)**, **(1. 13)** y **(1. 14)** y que se puede ver en **(1. 16)** arroja una dependencia de la resistividad con  $T^{1/2}$  (o de la conductividad con el inverso de la raíz cuadrada) mientras que los datos empíricos arrojan una dependencia aproximadamente lineal entre la resistividad y la temperatura absoluta (Young & Freedman, 2009, pág. 852).

El mismo modelo de Drude predice la conductividad térmica de los metales de manera aproximada, con relativa sencillez (Ashcroft & Mermin, 1976, pág. 22) y aunque como se ha visto, la exagerada simplicidad del modelo no arroja parámetros del todo precisos, lleva a definir la llamada Ley de Wiedemann-Franz. El cociente entre la conductividad térmica y la conductividad eléctrica de los metales es directamente proporcional a la temperatura absoluta, por una constante denominada “Número de Lorenz” cuyo valor predicho por el modelo de Drude se calcula en función de la constante de Boltzmann al cuadrado y la carga del electrón, arrojando un resultado en el orden:

$$L = \frac{\kappa}{\sigma \cdot T} = \frac{4 \cdot k^2}{\pi \cdot e^2} \approx 1,0 \cdot 10^{-8} \text{ W} \cdot \Omega / \text{K}^2 \quad (1. 17)$$

En la Figura 1.4 se puede ver que el valor del número de Lorenz para diferentes metales a diferentes temperaturas siempre se encuentra alrededor de  $2,44 \cdot 10^{-8} \text{W} \cdot \Omega / \text{K}^2$

ELEMENT	273 K		373 K	
	$\kappa$ (watt/cm-K)	$\kappa/\sigma T$ (watt-ohm/K <sup>2</sup> )	$\kappa$ (watt/cm-K)	$\kappa/\sigma T$ (watt-ohm/K <sup>2</sup> )
Li	0.71	$2.22 \times 10^{-8}$	0.73	$2.43 \times 10^{-8}$
Na	1.38	2.12		
K	1.0	2.23		
Rb	0.6	2.42		
Cu	3.85	2.20	3.82	2.29
Ag	4.18	2.31	4.17	2.38
Au	3.1	2.32	3.1	2.36
Be	2.3	2.36	1.7	2.42
Mg	1.5	2.14	1.5	2.25
Nb	0.52	2.90	0.54	2.78
Fe	0.80	2.61	0.73	2.88
Zn	1.13	2.28	1.1	2.30
Cd	1.0	2.49	1.0	
Al	2.38	2.14	2.30	2.19
In	0.88	2.58	0.80	2.60
Tl	0.5	2.75	0.45	2.75
Sn	0.64	2.48	0.60	2.54
Pb	0.38	2.64	0.35	2.53
Bi	0.09	3.53	0.08	3.35
Sb	0.18	2.57	0.17	2.69

Source: G. W. C. Kaye and T. H. Laby, *Table of Physical and Chemical Constants*, Longmans Green, London, 1966.

Figura 1.4 Número de Lorenz para diferentes materiales a diferentes temperaturas. Se puede observar la poca variabilidad del mismo. (Ashcroft & Mermin, 1976, pág. 21)

El modelo de Drude, del año 1900 y con una simplicidad única, se ajusta correctamente a la ley de Ohm y permite obtener algunos parámetros de la conducción eléctrica en el orden, pero no es de ninguna manera una teoría completa de la conducción a nivel microscópico. Los libros de física universitaria que se usan en los cursos de física general de las carreras de profesorado e ingenierías, utilizan la simplicidad de este modelo para describir la conducción en sus capítulos referidos a la electricidad, pero en capítulos posteriores que exceden a dichos cursos presentan modelos más completos incluyendo el modelo de Sommerfield y la teoría de bandas de Bloch (Serway & Jewett, Física para Ciencias e Ingeniería con Física Moderna, 2009) (Young & Freedman, 2009) (Halliday, Resnick, & Krane, 1999) (Giancoli, 2009).

## Alcances de la estadística Clásica

La teoría de Drude, por sí sola, resulta insuficiente para explicar varias cosas. Esto se debe en primera instancia a que los electrones no obedecen las leyes de la física clásica. El primer supuesto planteado, de choques elásticos con los iones de la red, no se cumple totalmente. Los electrones son partículas demasiado livianas.

Existe un criterio más o menos empírico que permite evaluar si un conjunto de partículas puede ser tratado con estadística clásica o cuántica. Se basa en evaluar si hay superposición entre las longitudes de onda características de los electrones que se define con la relación de De Broglie:

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (1. 18)$$

Si los electrones se hallan en equilibrio térmico, y se consideran libres, según (1. 1) podemos decir que poseen una energía media que se relaciona con su cantidad de movimiento medio de la siguiente manera:

$$\frac{p_{med}^2}{2 \cdot m} = \frac{3 \cdot k \cdot T}{2} = E \quad (1. 19)$$

Al suponer una partícula cuántica, la energía cinética promedio para cada partícula por grado de libertad se modificaría a  $\frac{kT}{\sqrt{2\pi}}$ , resultado que proviene de la introducción del término de degeneración que escapa al alcance de este trabajo (Eisberg & Resnick, 2000, pág. 462). De (1. 18) y (1. 19) y definiendo  $\hbar$  como la constante de Planck  $h/2\pi$  se obtiene la expresión

$$\frac{2\pi}{\lambda} = \sqrt{\frac{2 \cdot m \cdot E}{\hbar^2}} \quad (1. 20)$$

Si se despeja la longitud de onda térmica de De Broglie (Hermann, 2005, pág. 84) utilizando  $\frac{kT}{\sqrt{2\pi}}$  para cada grado de libertad, se obtiene (1. 37) para la longitud de onda media de los electrones, la siguiente expresión.

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2 \cdot \pi \cdot m \cdot k \cdot T}} \quad (1. 21)$$

Sólo se puede utilizar estadística clásica cuando la longitud de onda térmica de las partículas sea mucho menor que la distancia promedio entre ellas. Si dicha longitud de onda se encontrara en el orden de la distancia entre partículas estaríamos ante partículas cuyas ondas asociadas se traslapan y superponen, por lo que observaríamos interacción de naturaleza cuántica entre ellas. Esta interacción no puede modelarse como choques elásticos clásicos y requiere el uso de una estadística distinta.

La distancia entre partículas la podemos estimar a partir de dividir el volumen total sobre el que se está trabajando, por el número de partículas  $N$ . Esto me dará el volumen promedio que tiene cada partícula. Una especie de densidad volumétrica que debe ser mucho mayor que el cubo de la longitud de onda térmica de las partículas.

$$\lambda^3 \ll \frac{V}{N} \quad (1. 22)$$

De esta manera, a partir de (1. 37) y (1. 37) se puede establecer el criterio (1. 23) para saber si la estadística clásica es utilizable, a partir de la temperatura y de la densidad numérica de partículas a considerar. (Hermann, 2005, pág. 84)

$$h \ll \left(\frac{V}{N}\right)^{\frac{1}{3}} \sqrt{2\pi \cdot m \cdot k \cdot T} \quad (1. 23)$$

Como ejemplo de esto se aplica el criterio (1. 39) a un bloque de cobre de  $1\text{cm}^3$  a  $300\text{K}$ , que por su densidad de  $8,96\text{g/cm}^3$  y masa atómica  $63,5 \text{ g/mol}$  posee  $8,49 \cdot 10^{22}$  electrones libres. Así el factor de la derecha tendrá un valor de  $3,5 \cdot 10^{-34} \text{ J.s}$ , que es menor que la constante de Planck  $h=6,626 \cdot 10^{-23} \text{ J.s}$ , lo que quiere decir que las longitudes de onda de los electrones en el cobre excitados térmicamente, se traslapan entre sí, y el gas de electrones a temperatura ambiente no puede estudiarse utilizando la mecánica clásica, o lo que es lo mismo, no se pueden modelar los electrones de un metal como un gas ideal clásico.

### La mecánica cuántica.

Durante la primera mitad del siglo XX ya se observaba la utilidad didáctica de estudiar los modelos más modernos y completos a partir de los modelos clásicos, mediante la

introducción gradual de elementos de mecánica cuántica para obtener explicaciones satisfactorias del comportamiento de los sólidos como se ve en (Slater, 1951) (DuBridge, 1939). DuBridge comienza su descripción con el modelo de Sommerfeld, el cual es el primer modelo que considera las implicancias descritas anteriormente de considerar a los electrones como ondas-partículas, pero supone que estos están atrapados dentro del metal, como una partícula dentro de un pozo cuadrado de potencial. El problema de la partícula en una caja, o pozo cuadrado de potencial infinito en una dimensión es uno de los primeros problemas resueltos y enseñados en mecánica cuántica y no es difícil aplicarlo a esta situación específica. Cualquier modelo que considere la naturaleza ondulatoria de los electrones se resuelve a partir de la ecuación de Schrödinger que define la dinámica de un sistema cuántico. Los detalles de estos fundamentos se pueden consultar en (Eisberg & Resnick, 2000) pero en (1. 24) se presenta esta ecuación que rige a los sistemas mecánico-cuánticos.

$$\hat{H} \cdot \Psi = i \cdot \hbar \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (1. 24)$$

En la ecuación (1. 40) el Hamiltoniano H representa la energía del sistema siendo la segunda componente U la energía potencial del sistema como se ve a continuación.

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U \quad (1. 25)$$

En el caso de esta propuesta, se trabajó con la ecuación para problemas independientes del tiempo ya que no importa el comportamiento temporal del electrón, dado que en todos los problemas a considerar la energía potencial del sistema U, responderá a una forma U(x) únicamente dependiente de la posición. Para encontrar los estados estacionarios de un sistema, en la mayoría de los problemas es posible obviar la evolución temporal si proponemos una solución por separación de variables independientes como se puede leer a continuación.

$$\Psi(x, t) = \zeta(t) \cdot \psi(x) \quad (1. 26)$$

En (1.26) el lado derecho de la ecuación es el producto de una miembro que depende del tiempo y otro que depende estrictamente de la posición, de modo que la única forma de que esta igualdad sea siempre válida es que ambos se igualen a una

constante. En este caso, esa constante es la energía del sistema,  $E_n$ . El subíndice  $n$  nos habla de posibles estados de energía diferentes para el sistema, cada uno asociado a una función de onda  $\Psi_n(x,t)$  diferente. De hecho, los posibles valores de energía que el sistema puede tomar son en realidad los autovalores del operador hamiltoniano. Si bien no conocemos la forma de la ecuación  $\psi(x)$ , sabemos que en general, para problemas donde  $U$  depende solo de  $x$ , será una solución de la ecuación (1. 27) donde  $n$  será un número natural.

$$\hat{H} \cdot \psi_n(x) = E_n \cdot \psi_n(x) \quad \text{con } n = 1,2,3 \dots \quad (1. 27)$$

### Pozo cuadrado de potencial infinito

El problema de una partícula en un pozo de potencial infinito, situación a la que también se le suele dar el nombre de “partícula en una caja” cuando se trabaja en tres dimensiones, es el problema idealizado más sencillo existente que arroja como resultado “estados ligados”. Este problema tiene alto valor teórico y didáctico e ilustra de manera simplificada el comportamiento cuántico de los electrones en un sólido, Un pozo de potencial infinito no existe como tal, pero es un problema teórico ideal en el que se considera que la partícula está encerrada en una caja o recinto del que no puede escapar de ninguna manera.

La función del potencial es una función partida que se representa en (1. 28).

$$U(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } |x| < L \\ \infty & \text{si } |x| > L \end{cases} \quad (1. 28)$$

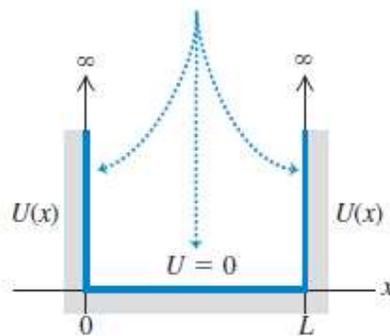


Figura 1.5 Representación de un pozo cuadrado de potencial infinito de ancho L

La Figura 1.5 ilustra esquemáticamente la forma del pozo. Clásicamente una partícula encerrada en un pozo de potencial de estas características puede tener cualquier energía, es decir, todas las energías  $E > 0$  son posibles.

Sus estados, serían los equivalentes a los de una partícula libre, y esta distribución de potencial solo supondría una restricción en cuanto a las posiciones que puede ocupar la partícula, y no en cuanto a la energía que pueda tener.

Sin embargo, en este desarrollo una partícula sometida a las reglas de la mecánica cuántica e interactuando con un potencial de estas características no puede tener cualquier energía, sino que estará en uno de los llamados estados ligados (Cohen-Tannoudji, Laloë, & Diu, 1977, pág. 77).

Las posibles energías que la partícula puede poseer conforman un espectro de energías discreto, o expresado de otra manera, la energía está cuantizada.

En este caso particular el alto de las barreras que confinan a la partícula es infinito, por lo que no existe función de onda fuera del pozo y la partícula nunca saldrá de este. Únicamente existirán soluciones dentro del pozo de potencial, lo que se formaliza a partir del Hamiltoniano que tomará la forma de una función partida.

$$\hat{H}(x) = \begin{cases} \hat{T} = -\frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} & \text{si } |x| < L \\ \infty & \text{si } |x| > L \end{cases} \quad (1. 29)$$

Fuera del pozo entonces, no hay función de onda, pero al plantear la ecuación de Schrödinger dentro del pozo, se obtiene la ecuación en la que  $E$  representa la energía que tiene la partícula:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = E \cdot \psi(x) \quad (1. 30)$$

El resultado de (1. 30) es una ecuación diferencial de orden 2, con variables separables, cuya resolución completa se puede consultar en la bibliografía (Cohen-Tannoudji, Laloë, & Diu, 1977, pág. 77) (Eisberg & Resnick, 2000, pág. 257). Este es uno de los problemas que los alumnos de profesorado resuelven completamente, por su sencillez matemática y riqueza conceptual, por lo que se consideró de vital importancia su inclusión en esta tesis.

Una solución posible para esta conocida ecuación se plantea a continuación:

$$\psi(x) = A.\text{sen}(k.x) + B.\text{cos}(k.x) \quad \text{con } k = \sqrt{\frac{2.m.E}{\hbar^2}} \quad (1.31)$$

A partir de imponer condiciones de frontera a este problema, relacionadas con la imposibilidad de existencia del electrón fuera del pozo de potencial, es que la función de onda toma su forma definitiva.

$$\psi(0) = \psi(L) = 0 \quad (1.32)$$

Las condiciones de frontera son (1. 32) y mientras establecen que la función de onda vale 0 en ambos extremos, también imponen que la onda sea estacionaria, es decir, que el número de onda  $k=n.\pi/L$  con  $n$  siendo un número natural. De este resultado en combinación con (1. 31) es que se obtiene la expresión siguiente:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2.m.L^2} n^2 \quad \text{con } n = 1,2,3 \dots \quad (1.33)$$

La expresión (1. 33) expresa todos los posibles valores que puede tomar la energía de una partícula encerrada en un pozo unidimensional de profundidad infinita, donde  $L$  es el ancho del pozo,  $m$  la masa de la partícula y  $n$  es cualquier número natural.

También se observan los saltos energéticos entre los niveles de energía a medida que el número cuántico  $n$  va creciendo.

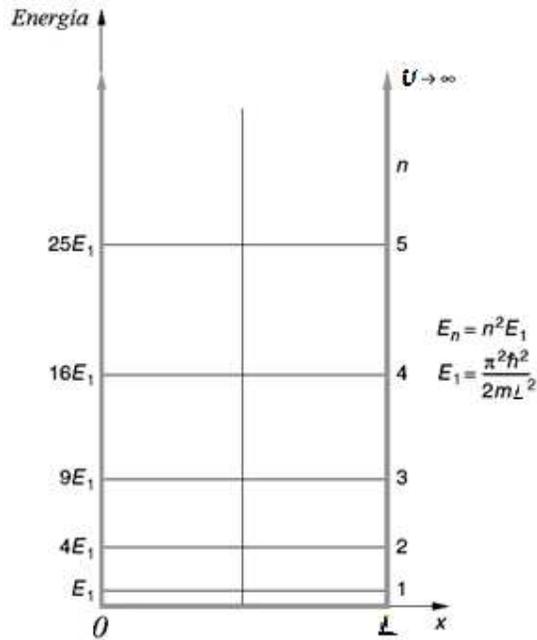


Figura 1.6 Niveles energéticos permitidos para una partícula en un pozo cuadrado infinito de potencial

Lo más probable, para un electrón en un sistema como el descrito, es ocupar el nivel más bajo de energía posible, pudiendo excitarse y ocupar otros niveles posteriormente.

A partir de aquí, el modelo a trabajar plantea la cuestión de qué sucedería si un material modelado como un pozo infinito tuviera un gran número de electrones.

### El principio de exclusión de Pauli.

El principio de exclusión de Pauli establece que dos fermiones (partículas de spin semi entero) no pueden estar en el mismo estado cuántico. (Hermann, 2005, pág. 119)

Esto fue planteado de esta manera en 1925 para resolver el problema de los niveles de los electrones en los átomos polieletrónicos, pero posteriormente se descubrió que este principio era parte de una observación mucho más fundamental sobre la naturaleza de los electrones. Los electrones son partículas indistinguibles, lo cual quiere decir que aunque de manera clásica las partículas se pueden “marcar” para distinguir unas de otras, de manera cuántica dos electrones no podrán distinguirse uno del otro, y no pueden marcarse por el principio de incertidumbre de Heisenberg (Eisberg & Resnick, 2000, pág. 356).

Según el principio (general) de Pauli, en un sistema con  $N$  partículas indistinguibles la función de onda del sistema es o bien completamente simétrica o bien completamente

antisimétrica (Hermann, 2005, pág. 119), y eso depende del tipo de partículas con las que se esté trabajando. Cuando la función de onda del sistema es simétrica, se llama a esas partículas bosones, y cuando es anti simétrica, se habla de un sistema compuesto por fermiones.

En un sistema compuesto por dos electrones que no interactúan entre sí, en un estado dado, la función de onda del sistema que describe la dinámica de ambos electrones puede expresarse como el producto de las funciones de onda independientes de cada electrón. Los estados posibles del sistema se pueden expresar con la ecuación (1. 34) donde el número establece el estado energético en el que se encuentra cada electrón y ambos estados conviven en superposición hasta que la función de onda colapse (A y B, cuyas funciones de onda han sido distinguidas por cuestiones de notación matemática, no son distinguibles de manera física). El signo menos que une ambos estados, refiere a la antisimetría de la función de onda del par de electrones, que se clasifican en la familia de los fermiones.

$$\psi(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot [\psi_A(1) \cdot \psi_B(2) - \psi_A(2) \cdot \psi_B(1)] = 0 \quad (1. 34)$$

Esta condición de fermión o bosón se formaliza finalmente en un nuevo número cuántico denominado spin, el cuál será entero en el caso de los bosones, y semientero en el caso de los fermiones.

En un pozo unidimensional, como el postulado más arriba, los números cuánticos de un electrón serían el número  $n$ , y el número de spin, que para los electrones puede tener dos valores posibles. De esta manera, solo puede haber dos electrones con cada nivel de energía posible en la caja.

Esta es la gran diferencia con un gas de partículas clásicas. Las partículas clásicas no tienen ninguna limitación de número de partículas con determinada energía.

El modelo de Sommerfeld en cambio, considera esta limitación cuántica que predice que si hay  $N$  partículas en un gas de electrones, estas van ocupando todos los niveles energéticos desde el más bajo.

Si el metal estuviera a  $T = 0 K$ , entonces los primeros  $N/2$  niveles estarían totalmente llenos con 2 partículas cada uno.

Este sistema de un pozo unidimensional, con un número  $N$  muy grande de partículas que no interactúan entre sí, se representa adecuadamente mediante la distribución

estadística de Fermi-Dirac que mejora la distribución de Maxwell Boltzmann para un gas clásico en el sentido de que considera el spin y el principio de exclusión al calcular la probabilidad de encontrar una partícula en un determinado estado energético. Se tiene en cuenta el hecho de que no pueden existir dos partículas con la misma combinación de números cuánticos, o dicho de otra forma, sólo pueden existir dos electrones con la misma energía (mismo número cuántico principal, pero distinto número de spin). Esto dará lugar a que los electrones no se distribuyan en el espacio de energías de la misma manera que lo haría un gas ideal.

### Distribución de Fermi-Dirac

La distribución de Fermi-Dirac surge de la aplicación del principio de exclusión de Pauli a un conjunto muy grande de partículas de spin semientero. Para el caso que se plantea aquí, establece que la probabilidad de que un electrón del conjunto tenga una energía determinada  $E$  se define según (1. 35) donde  $k.T$  es el término que representa a la energía promedio de translación de las partículas debido a la temperatura en la que se encuentran siendo  $T$  la temperatura en kelvin,  $k$  la constante de Boltzmann, y  $E_f$  la llamada energía de fermi, concepto que se definirá a continuación.

$$f(E) = 1/(e^{(E-E_f)/kT} + 1) \quad (1. 35)$$

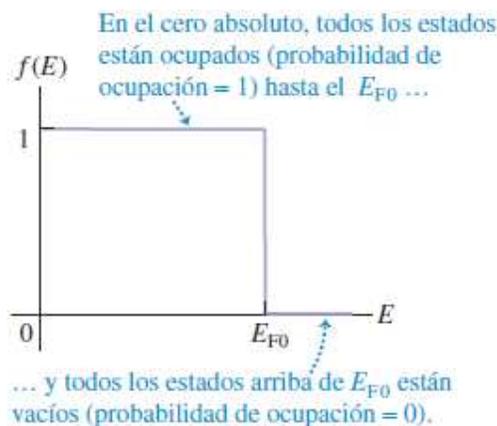


Figura 1.7 Distribución de Fermi-Dirac a temperatura  $T = 0$  K (Young & Freedman, 2009, pág. 1449)

En la Figura 1.7 se puede ver la distribución de Fermi-Dirac a temperatura  $T = 0\text{ K}$ . La energía de Fermi constituye la energía límite hasta la cual los estados se encuentran totalmente ocupados. A  $T = 0\text{ K}$  el total de las partículas se encontrarán en un estado energético inferior a este nivel, por lo que los estados de mayor energía se encontrarán libres.

El metal a  $T = 0\text{ K}$  no existe en la realidad, pero podemos evaluar la forma de esta distribución para una temperatura mayor al cero absoluto.  $T > 0\text{ K}$

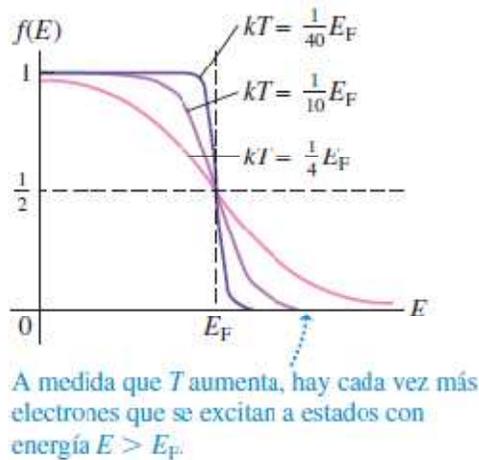


Figura 1.8 Distribución de Fermi-Dirac a temperaturas distintas de 0K (Young & Freedman, 2009, pág. 1449)

Mientras mayor sea la temperatura del sistema, más se alejará la distribución de la gráfica correspondiente al 0 absoluto, teniendo la forma de la función una cierta antisimetría con respecto al eje que marca la energía de Fermi. Esto significa que si la temperatura del material es mayor, es posible encontrar, siempre con probabilidad menor a  $\frac{1}{2}$  algunos electrones en estados de energía mayor a la de Fermi. Conociendo las energías de los electrones según esta estadística se pueden ajustar los parámetros calculados según la distribución clásica, a partir de la velocidad media de los electrones que determinaba los tiempos de relajación, los caminos libres medios de los electrones, y por ende la conductividad del material.

Según la expresión (1. 33) y considerando el sistema en cuestión un trozo de metal unidimensional de longitud  $L$ , la energía mínima que podría tener un electrón de conducción en este metal imaginario sería

$$E_1 = \frac{h^2}{8 \cdot m_e \cdot L^2} \tag{1. 36}$$

Este nivel se llenaría con 2 electrones, ya que por el principio de exclusión de Pauli, no puede haber más de un fermión con spin arriba y un fermión con spin abajo en este nivel.

De esta manera, en la situación hipotética de que el material fuera por ejemplo una muestra con  $N$  átomos de cobre, y que se encontrara a  $T = 0 \text{ K}$ , de manera que no hubiera ninguna contribución térmica a la energía de las partículas, los electrones tendrían las energías correspondientes a todos los niveles hasta  $n=N/2$ , el cuál sería el nivel de la energía de Fermi para este metal. Utilizando (1. 33) se puede obtener una expresión para esta energía, que dependerá del factor  $N/L$ , definido como la densidad lineal de átomos de cobre del metal.

$$E_F = E_{N/2} = \frac{\hbar^2}{32 \cdot m_e} \left( \frac{N}{L} \right)^2 \quad (1. 37)$$

Para el cobre, la densidad numérica de electrones es  $8,49 \cdot 10^{28} / \text{m}^3$ , como ya fue calculado anteriormente.

Dado que este trabajo está dirigido a enseñar física a estudiantes de nivel terciario, se trabajará planteando el modelo unidimensional, como está establecido en (1. 37), ya que este presenta menor complejidad matemática. Posteriormente se obtienen algunos resultados que ajustan a la realidad generalizando los resultados más simples a 3 dimensiones.

Conociendo la densidad numérica (volumétrica) del cobre  $N/V$ , se puede estimar la densidad lineal  $N/L$  como la raíz cúbica de la misma:  $(N/V)^{1/3}$

Utilizando la ecuación (1. 37) se obtiene un valor de energía de Fermi para el cobre de 1,82 eV.

Este valor, en sí mismo, quiere decir que en un trozo de cobre unidimensional a  $T = 0 \text{ K}$  (que es una idealización), los electrones que más energía posean estarán en el orden de 1,82 eV.

Si el cobre se encuentra a cualquier temperatura mayor al cero absoluto  $T > 0 \text{ K}$ , según este modelo, habrá una fracción de electrones con energía en el orden de la energía de Fermi que tendrán algún tipo de movilidad y podrán ser considerados electrones de conducción. Estos serán los electrones que pueden adquirir algo de energía adicional y “saltar” a un nivel energético superior, o interactuar con los iones y transferirla a la

red. Los electrones muy por debajo de este nivel energético no pueden modificar su energía ya que todos los niveles energéticos cercanos no están permitidos debido a que ya están ocupados por 2 electrones, el número máximo de fermiones que puede haber en cada nivel. De esta manera, salvo que obtengan la energía necesaria para ir a un nivel energético mucho más alto, estos electrones no serán electrones “libres”.

La temperatura de Fermi, es la temperatura que corresponde a partículas (térmicas) que tienen la energía de Fermi. La energía de las partículas según el principio de equipartición clásico (utilizamos este valor, ya que aún estamos construyendo un modelo primitivo semi-cuántico) es de  $\frac{1}{2} kT$  por cada grado de libertad, que en este caso es solo uno, y para 1,82eV equivale a una temperatura de 7000 K. En un metal tridimensional esta temperatura es mucho mayor y supera con creces a la temperatura real a la que se puede encontrar cualquier metal en estado sólido, o incluso en estado líquido, por lo que la distribución para cualquier temperatura ordinaria es mucho más parecida a la distribución a  $T = 0 K$  que a cualquier otra distribución clásica.

Cuando la temperatura es mayor al cero absoluto ( $T > 0 K$ ), resulta más adecuado definir a la energía de Fermi ya no como el último nivel energético ocupado por partículas, sino como el nivel que tiene una probabilidad  $\frac{1}{2}$  de estar ocupado.

Los iones tienen una energía del orden de  $kT$ , por lo que solo aquellos electrones con energía dentro del intervalo más-menos  $kT$  de la energía de Fermi pueden adquirir energía cuando la temperatura aumente a causa de choques con la red. A una temperatura  $T = 300K$ , la energía térmica que poseen es solo 0,026eV por lo que una mínima fracción de los electrones tendrá una energía de 1,85eV ( $1,82eV + 0,026eV$ ) y podrá ocupar niveles energéticos superiores a la energía de Fermi, que no estén completamente llenos. Esto significa que esos serán los únicos electrones capaces de interactuar con los iones y moverse por la extensión del metal, ya que son los únicos que pueden modificar su energía cinética y velocidad mediante choques con la red. De esta manera, el número de electrones que participan en la conducción parecería alterado con la temperatura (vamos a ver que no es así), pero nunca es un número considerable del total de portadores de carga que potencialmente podrían participar, a diferencia del modelo clásico que consideraba que en los metales al menos un electrón por átomo participaba de la conducción eléctrica.

Este modelo, planteado de esta manera, es principalmente didáctico pero de central importancia, debido a que combina la mecánica estadística con la mecánica cuántica y es el primer acercamiento al tema que tendrán los futuros docentes.

Al generalizarlo para tres dimensiones, no es la densidad numérica lineal el único valor que se modifica. También hay que ir a la raíz del modelo, donde se definieron los estados energéticos para un pozo de potencial infinito unidimensional en vez de uno tridimensional. La energía de Fermi para un pozo de potencial infinito tridimensional está definida en la ecuación (1. 38) y su demostración se puede ver en los libros de texto (Tipler, 1981, pág. 355).

$$E_F = \frac{h^2}{8 \cdot m_e} \left( \frac{3 \cdot N}{\pi \cdot V} \right)^{2/3} \quad (1. 38)$$

Así, para el cobre se obtiene una energía de Fermi de  $1,13 \cdot 10^{-18}$  J, que equivalen a 7,05 eV.

Esta energía, además, modifica sustancialmente la velocidad media a la que se desplazan los electrones de conducción, ya que tienen mucha más energía que la considerada clásicamente.

Para una temperatura mucho menor que la temperatura de Fermi, los electrones que ocuparán estados cuánticos no ocupados por completo tendrían en promedio, la energía de Fermi. Esto quiere decir, que su velocidad promedio podrá ser determinada a partir de la energía de Fermi y de la suposición de que toda esta energía se corresponde con energía cinética de traslación.

$$u_f = (2 \cdot E_f / m_e)^{1/2} \quad (1. 39)$$

En (1. 39),  $u_f$  es la velocidad de Fermi, o rapidez promedio a la que se desplazan los electrones con movilidad y  $E_f$  es la energía de Fermi que dependerá del material.

De esta manera, para el cobre, cuya energía de Fermi había sido calculada como 7,05 eV, la rapidez de sus electrones de conducción está en el orden de  $1,6 \cdot 10^6$  m/s, un orden de magnitud superior a la calculada con la teoría clásica.

Utilizando la ecuación clásica de la conductividad (1. 9) y la definición del tiempo de relajación a partir de la rapidez media de las partículas y el camino libre medio (1. 13) se obtiene una expresión para la conductividad basada en los postulados clásicos de los choques entre los electrones y los iones, y la fuerza eléctrica aplicada sobre los primeros. En esta expresión presente a continuación, la rapidez media de los electrones es calculada utilizando la mecánica estadística para partículas con spin semientero.

$$\sigma = \frac{n \cdot e^2 \cdot l}{m \cdot u_f} \quad (1. 40)$$

En (1. 40) hay dos problemas a resolver: Por un lado la velocidad de Fermi es independiente de la temperatura del material para la mayoría de las temperaturas ordinarias, por lo cual la conductividad sería independiente de la temperatura, y por el otro, la conductividad calculada de esta manera con los datos de camino libre medio estimados en el modelo clásico son muchísimo menores que los valores experimentales (Tipler, 1981, pág. 359).

La solución a ambos problemas radica en el término del camino libre medio, el cual no se puede estimar únicamente como la distancia interatómica entre los iones, sino que debe ser calculado teniendo en cuenta la dispersión de las ondas de electrones, que surge por las imperfecciones de la red cristalina. Las imperfecciones más corrientes se deben a las impurezas y a las vibraciones térmicas. (Tipler, 1981, pág. 359)

Los iones del cristal son, en el modelo más sencillo posible y a cualquier temperatura mayor a cero, osciladores armónicos cuánticos en constante movimiento, independientes entre sí pero que oscilan a la misma frecuencia en todo el cristal, la cual depende de la temperatura del mismo (En modelos posteriores no todos los iones oscilan con la misma frecuencia, pero para este trabajo se considera esta premisa). Este es el modelo más simple que se puede plantear para la dispersión de electrones en sus interacciones con fonones y se denomina Modelo de Einstein (Hook & Hall, 1991, pág. 50) (Ashcroft & Mermin, 1976, pág. 462).

En el modelo de Einstein se supone que la sección eficaz se calcula de la misma manera que en el modelo clásico, pero que el radio del área que presentan los iones no es el radio atómico sino que depende del desplazamiento cuadrático medio del átomo

puntual en un plano perpendicular a la dirección del movimiento del electrón, es decir que la sección eficaz es la sección que ocupa el oscilador, y si el electrón se mueve en dirección del eje z se calcula de la siguiente manera.

$$\overline{r^2} = \overline{x^2} + \overline{y^2} \quad (1.41)$$

Teniendo en cuenta el teorema de equipartición, y la definición de la energía de un oscilador, podemos concluir que dicho oscilador tiene dos grados de libertad y que siendo  $K$  la constante elástica del oscilador, la energía del mismo se puede calcular con la expresión siguiente:

$$\frac{1}{2}K \cdot \overline{r^2} = \frac{1}{2}M \cdot \omega^2 \cdot \overline{r^2} = kT \quad (1.42)$$

De esta manera, la sección eficaz sí depende de la temperatura, por lo que el recorrido libre medio también lo hace de manera que según las ecuaciones (1.42) y (1.14) se obtiene una nueva expresión para calcularlo:

$$\overline{l} = \frac{1}{n \cdot \pi \cdot r^2} = \frac{M \cdot \omega^2}{2\pi \cdot n \cdot k} \cdot \frac{1}{T} \quad (1.43)$$

Así, a partir de (1.40) y (1.43) se encuentra la expresión (1.44) donde la dependencia entre la conductividad y la temperatura es la observada empíricamente (la conductividad es inversamente proporcional a la temperatura absoluta), a diferencia de lo calculado mediante el modelo clásico.

$$\sigma = \frac{e^2}{m \cdot u_f} \frac{M \cdot \omega^2}{2\pi \cdot k} \cdot \frac{1}{T} \quad (1.44)$$

Este modelo construido sobre conceptos fundamentales a los que se les fueron agregando otras ideas, surgió de manera gradual y mediante un proceso continuo, según las formas de producción de conocimiento científico. De a un concepto por vez se fueron alcanzando explicaciones cada vez más completas sobre la naturaleza de los conductores, y se fueron planteando según la evolución histórica de la teoría.

El modelo final permite explicar el comportamiento microscópico y macroscópico de los metales, lo cual, si consideramos la cantidad de elementos del tipo metálico que existen sobre el total de los elementos posibles, es un resultado de importancia.

### **Teoría de bandas. Otros materiales.**

El modelo anterior no es eficaz para explicar el comportamiento de otros materiales que no son metálicos. Es un paso importante para el desarrollo de las actividades a plantear en la tesis, porque permite encontrar resultados apropiados a partir de un modelo mixto con elementos de física clásica, y otros de física cuántica, pero al no considerar las interacciones de los electrones con los iones de la red solo es útil para predecir el comportamiento de sustancias donde los electrones interactúen poco con los iones, como en el caso de los metales.

Para estudiar estas interacciones hay dos enfoques posibles:

Uno consiste en demostrar que cuando la ecuación se resuelve para electrones sujetos a un potencial periódico que representa a los iones de la red surgen bandas de energía. El otro, más sencillo, consiste en seguir el comportamiento de los niveles energéticos de átomos aislados a medida que estos se aproximan cada vez más para formar un sólido. (Serway, Moses, & Moyer, 2006, pág. 425)

El acercamiento más sencillo no se puede utilizar con los alumnos para los cuales está dirigido el presente trabajo, debido a que al momento de poner en práctica las secuencias desarrolladas, todavía no estudiaron el átomo desde una perspectiva más moderna que la de Bohr, por lo que se utilizaron las computadoras para sortear la complejidad matemática del primer planteo, y estudiar el potencial periódico en una sola dimensión.

Un modelo simple para estudiar la teoría de bandas es el modelo de Kronig-Penney, que considera un potencial periódico unidimensional de pozos cuadrados de potencial finitos. Lo importante del potencial, no es el hecho de que sea cuadrado, sino el hecho de que cumpla con la condición de periodicidad, es decir, que el potencial cumpla con:

$$U(x) = U(x + a) \quad (1.45)$$

Esto se puede ver de manera gráfica en la Figura 1.9 Modelo de potencial unidimensional para iones en una red donde es clara la correlación entre la posición de los iones en un arreglo unidimensional y el pozo o barrera de potencial que los modela, cuadrado para simplificar la matemática.

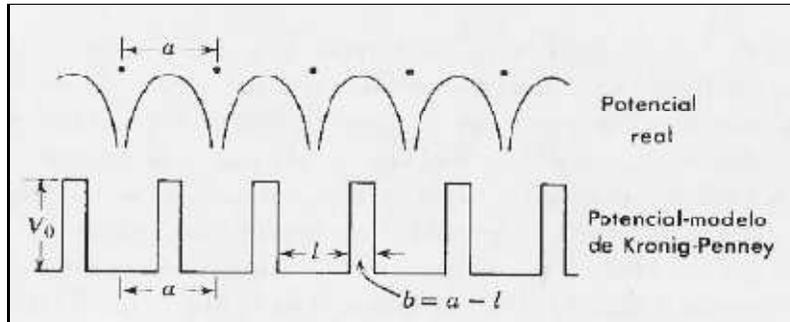


Figura 1.9 Modelo de potencial unidimensional para iones en una red (Eisberg & Resnick, 2000, pág. 531)

El teorema de Bloch establece la periodicidad de la función de onda que resuelve la ecuación de Schrödinger para un potencial periódico como el establecido en (1. 45) y en la Figura 1.9 Modelo de potencial unidimensional para iones en una red (Ashcroft & Mermin, 1976, pág. 178) (Fanchiotti, 1978, pág. 34). Como la ecuación de Schrödinger es lineal, esto quiere decir que se cumplirá la ecuación definida en (1. 46) con respecto a la función de onda.

$$\psi(x + a) = e^{-i.k.a} . \psi(x) \tag{1. 46}$$

De esta manera la ecuación de Schrödinger con un potencial periódico puede resolverse sin muchos inconvenientes, como se puede consultar en (Fanchiotti, 1978). La solución a este problema con infinitos pozos de potencial, arroja no infinitos niveles y una ecuación para encontrarlos, sino infinitas bandas de energía donde se agrupan estos niveles. Estas bandas se dan debido a que la cercanía de los átomos entre sí modifica los estados energéticos con respecto a la solución para un solo átomo o un solo pozo, como se puede ver en la Figura 1.10 Desdoblamiento de los niveles energéticos producto de la cercanía a otros potenciales.

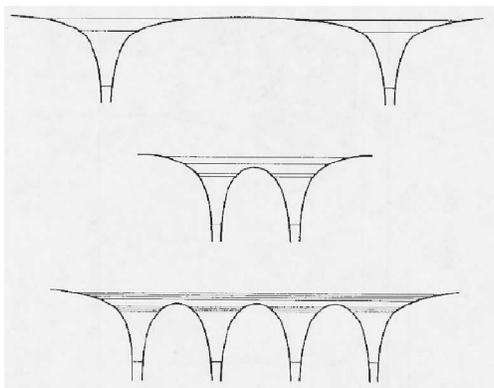


Figura 1.10 Desdoblamiento de los niveles energéticos producto de la cercanía a otros potenciales (Eisberg & Resnick, 2000, pág. 519)

Al evaluar 2 iones o pozos cercanos, se obtiene como resultado un doblete de niveles de energía cercanos entre sí, o un triplete para 3 átomos. En el caso de un sistema con infinitos pozos de potencial, se obtienen infinitos niveles de energía próximos unos a otros, y componen toda una banda de estados energéticos posibles para el electrón que interactúa con esos iones.

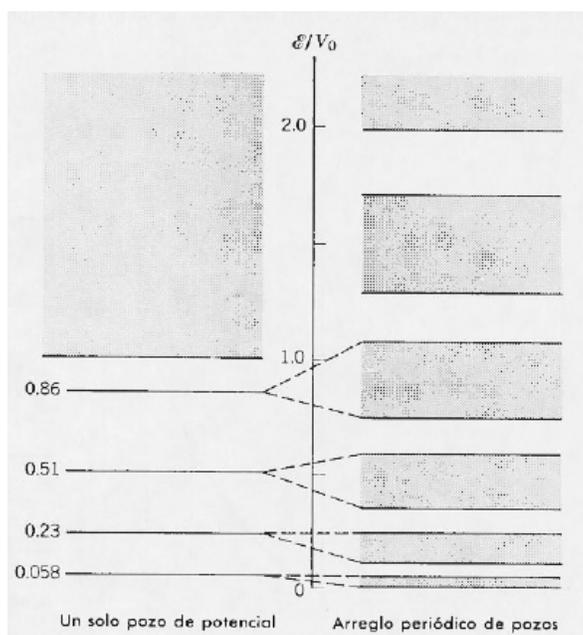


Figura 1.11 Comparación entre niveles simples en un pozo, y bandas de energía permitidas en un arreglo periódico infinito de pozos de potencial (Halliday, Resnick, & Krane, 1999, pág. 518)

Además, en esta solución se establecen un conjunto de autovalores que corresponden a estados ligados y otro conjunto de energías que corresponden a estados de

dispersión, donde el electrón se halla casi libre, y tiene un comportamiento similar al que se ve en los modelos anteriores. De esta manera hay bandas permitidas y bandas prohibidas para las energías que puede adoptar un electrón determinado.

Entre estos estados ligados, y los estados libres, hay “niveles” de energía que no están definidos como autoestados de la función, por lo que no están permitidos para el electrón que forma parte de este sistema.

Al haber infinitos pozos de potencial, en este modelo hay infinitos estados energéticos que se agrupan formando bandas de energía. En la realidad, la cantidad de iones de un sólido cristalino es inmensa, y aunque la cantidad de niveles no es infinito se puede suponer que es un número muy grande y los autoestados de energía están muy cercanos unos a los otros, formando prácticamente un continuo.

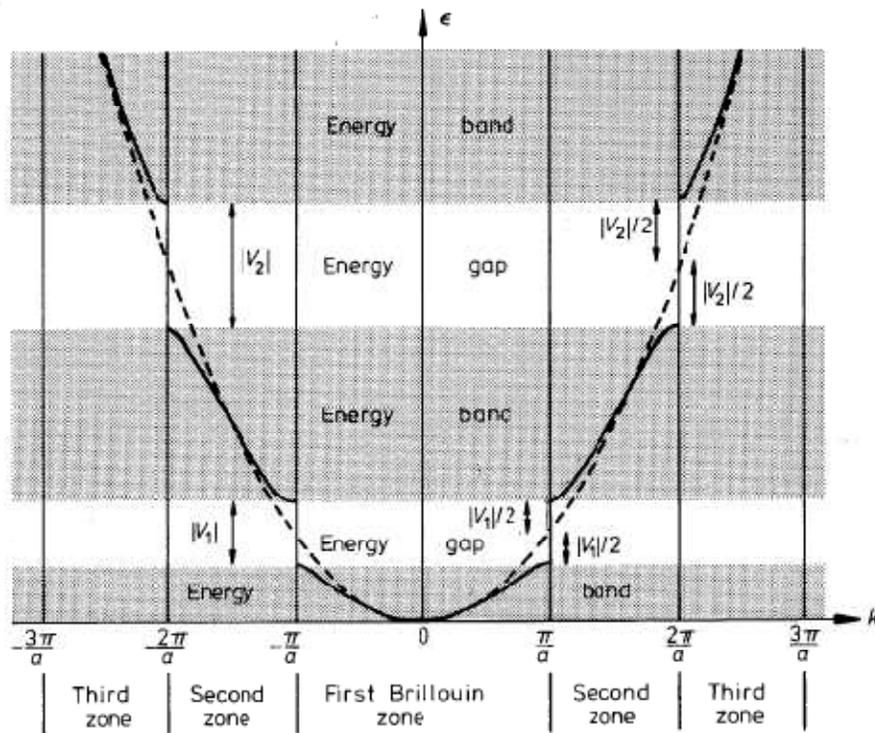


Figura 1.12 Las curvas completas muestran el efecto de una red periódica en la relación parabólica de dispersión que se obtiene para electrones no ligados (línea punteada). Las bandas de energía permitidas están indicadas con el sombreado. (Hook & Hall, 1991, pág. 103)

En la Figura 1.12 Las curvas completas muestran el efecto de una red periódica en la relación parabólica de dispersión que se obtiene para electrones no ligados (línea punteada). Las bandas de energía permitidas están indicadas con el sombreado. se

puede ver un diagrama  $E(k)$  en línea llena donde es visible que existen valores de energía prohibidos para los electrones en un cristal, y que la energía que tiene un electrón en estas condiciones se asemeja a la energía que tiene un electrón libre, en línea punteada, con excepción de la imposibilidad de ocupar los valores prohibidos.

Este último resultado se verá mejor con las simulaciones del capítulo 3 que permiten estudiar las funciones de onda para cada nivel.

Este nuevo modelo entonces permite explicar no solo los metales (buenos conductores) sino también otro tipo de materiales, debido a que estas bandas de energía tienen un número finito de niveles, por lo que pueden llegar a llenarse. En cada nivel de energía puede haber hasta dos electrones, como se estableció en el modelo donde solo se consideraba un pozo infinito de potencial, por lo que un determinado nivel puede o no estar lleno. Este comportamiento se generaliza para las bandas, donde una banda puede estar llena o no con la cantidad de electrones que puede recibir.

En un determinado material habrá estados de energía que se dividirán en 3 grandes tipos: Estados no permitidos que componen las llamadas bandas prohibidas, estados pertenecientes a bandas permitidas, pero totalmente ocupadas por electrones, y estados permitidos pertenecientes a bandas donde todavía hay niveles de energía disponibles para ser ocupados por electrones. En función de estos tres tipos de bandas y de su distribución en un material determinado es que se definirá si dicho material es un conductor, un aislante o un semiconductor. Los electrones se agruparan en los estados posibles de acuerdo a la función de distribución de Fermi-Dirac que se presentó previamente, por lo que los únicos electrones que tendrán movilidad serán los que posean una energía cercana a la energía de Fermi del material y puedan desplazarse a un nivel superior semivacío. En este evento es donde será relevante la existencia de la banda prohibida, ya que si la cantidad de energía que necesita un electrón para pasar a un nivel semivacío donde tenga movilidad es más alta de la que adquiere por medios externos, como la temperatura o un campo eléctrico, el material se comportará como un aislante (ver en Figura 1.13 Representación gráfica de niveles permitidos y prohibidos en diferentes tipos de materiales.).

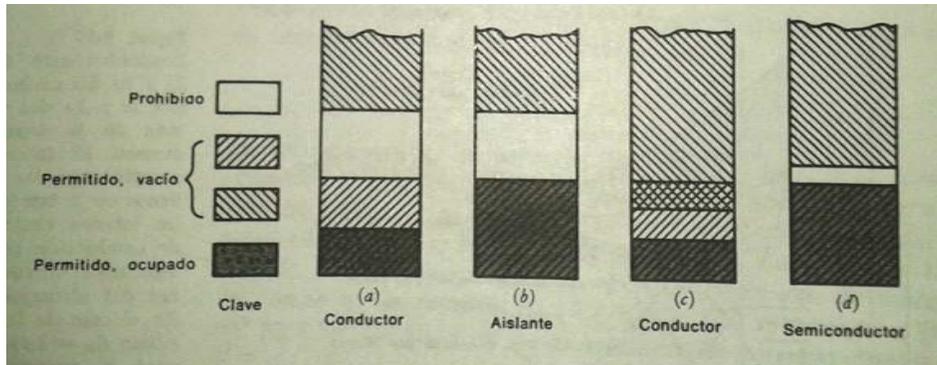


Figura 1.13 Representación gráfica de niveles permitidos y prohibidos en diferentes tipos de materiales. (Tipler, 1981, pág. 368)

Los materiales donde los electrones tienen niveles permitidos y vacíos adyacentes (a y c en la Figura 1.13) pueden tener electrones con movilidad que se comporten como libres y permitan el flujo de una corriente eléctrica como en el modelo estudiado previamente. Los materiales con una banda prohibida entre sus estados ocupados con electrones y sus estados vacíos pueden ser aislantes o semiconductores, dependiendo de la cantidad de energía que requiere un electrón para pasar de estado que puede ser mucha o poca (b y d).

Finalmente, para terminar de adaptar el modelo a la realidad habría que considerar una masa efectiva que no es exactamente igual a la masa del electrón para las ecuaciones de movimiento semiclásicas estudiadas anteriormente. Para electrones en estas circunstancias con este modelo de transporte se pueden conseguir resultados ajustables con la realidad modificando el valor de la masa según resultados empíricos, aunque esto supone una dificultad que escapa al alcance de la secuencia de actividades que este texto propone.

### Semiconductores

A pesar de que esta secuencia no está enfocada específicamente en los semiconductores, sino en estudiar fenomenológicamente diferentes modelos de conducción eléctrica y su evolución, se planteó una breve actividad que proponía resolver numéricamente la ecuación de onda para una configuración semejante a un semiconductor extrínseco en 1 dimensión, por lo que aquí se presentan los fundamentos de los semiconductores para que dicha actividad sea evaluada en

contexto. Un semiconductor extrínseco es un material semiconductor (es decir, con una banda de energía prohibida estrecha, en comparación con los materiales aislantes) al que se lo ha dopado con impurezas que modifican la estructura del material. Las impurezas son unos pocos átomos que reemplazan a los átomos de semiconductor en la red, pero que tienen una cantidad de electrones diferente en su capa de valencia o último nivel energético ocupado por lo que generan huecos (déficit de electrones) en la capa de valencia, o electrones libres en la capa de conducción (siguiente nivel al último ocupado) que permiten alterar la conductividad del material. (Halliday, Resnick, & Krane, 1999, pág. 539).

Por ejemplo, en un semiconductor tipo p, aparecerán niveles receptores que podrán tomar electrones de la capa de valencia para generar un hueco (espacio sin electrón que se comportará como un portador positivo de carga) y mejorar la conducción.

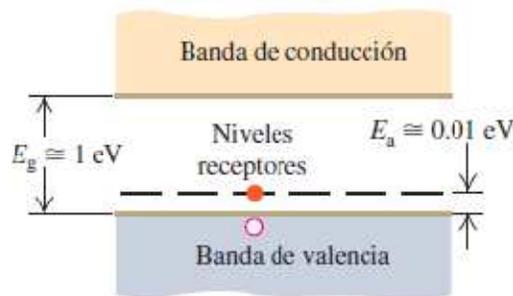


Figura 1.14 Niveles receptores en un semiconductor dopado, tipo p (Young & Freedman, 2009, pág. 1455)

Estos semiconductores dopados o extrínsecos se agrupan formando dispositivos como los diodos, que poseen un semiconductor dopado tipo p, y un semiconductor tipo n que genera niveles donores (que entregan electrones) por debajo de la banda de conducción. Aunque los modelos matemáticos no se presentan aquí ni se trabajaron en la secuencia con estudiantes, ya que se requeriría una cantidad de tiempo similar a lo utilizado con todos los modelos anteriores, es importante la idea de que en estos dispositivos la energía de Fermi del material queda en algún lugar de la banda prohibida, y que las bandas de valencia y de conducción de cada región del dispositivo tienen energías máximas y mínimas diferentes, lo que ocasiona que los electrones que se acomodan de acuerdo al movimiento térmico generen un campo eléctrico, como se indica en la Figura 1.15. La región n del semiconductor tendrá un exceso de electrones, mientras que la región p poseerá un exceso de huecos, que se comportan

como portadores de carga positiva. Algunos electrones pueden pasar por agitación térmica al nivel de conducción de la región p, pero estadísticamente se encontrarán en su estado de mínima energía posible, donde haya estados vacíos para ocupar.

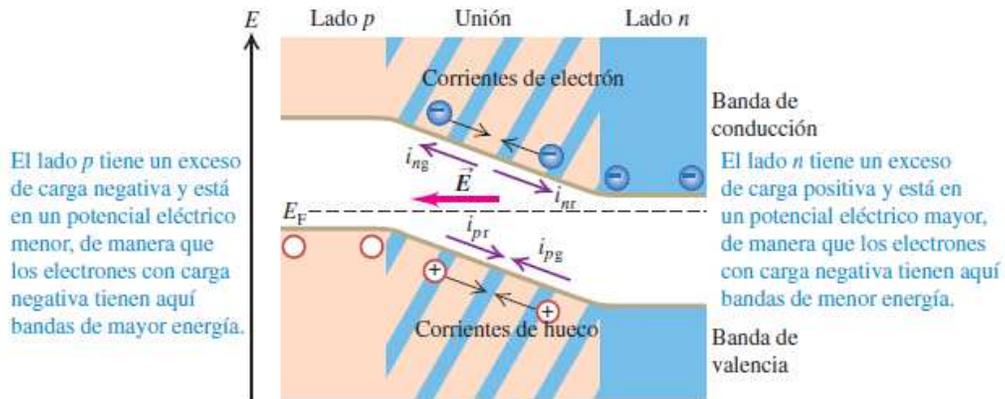


Figura 1.15. Semiconductor no polarizado. No hay campo eléctrico externo. (Young & Freedman, 2009, pág. 1455)

Sin embargo, se puede polarizar el semiconductor de dos maneras diferentes que ocasionan dos corrientes diferentes de distinta magnitud. Una opción es polarizar el diodo en inversa, es decir con un campo eléctrico que se dirija de la región n a la p, lo cual no ayudará a que los electrones que se encuentran en exceso en la región n se recombinen en la región p, ya que ni los huecos ni los electrones se desplazarán notoriamente de su estado de equilibrio y la corriente eléctrica de recombinación será muy pequeña.

Sin embargo, si se polarizara el diodo en directa, es decir con un campo eléctrico que se dirija de su región p a su región n, los electrones podrían obtener la energía que necesitan para desplazarse a los niveles de conducción y recombinarse.

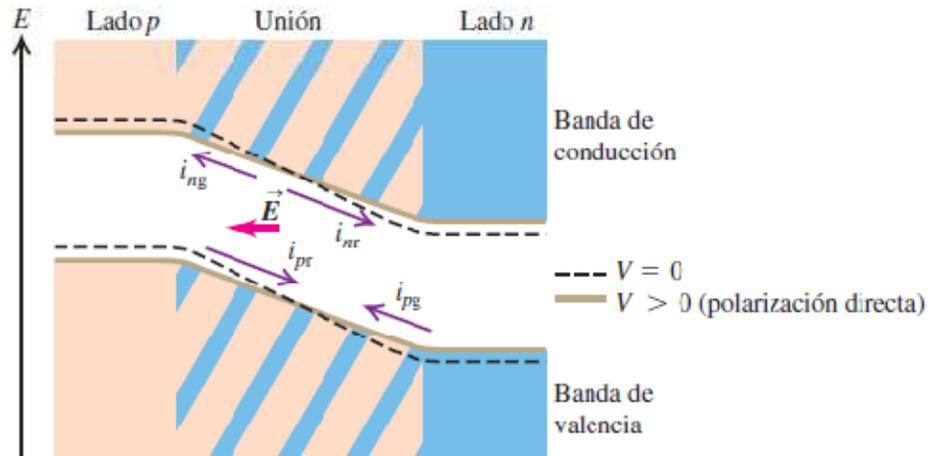


Figura 1.16. Semiconductor polarizado, con campo eléctrico externo que va de p a n (Young & Freedman, 2009, pág. 1456)

En los cálculos numéricos no se llegó a simular un diodo ni un LED. Solo se mostró la aparición de niveles donores y aceptores al agregar impurezas a cristales formados por una cantidad pequeña de átomos, pero además se mencionó que esta diferencia de energía que experimentan electrones y huecos al cambiar de nivel energético en la juntura n-p puede cristalizarse con la emisión de radiación en frecuencias bien definidas.

## Cap 2. Enseñanza de la Física

Es un hecho reconocido que existen varias metodologías de enseñanza además de la tradicional, consistente en clases expositivas y resolución de problemas. En el entorno de un instituto de formación docente corresponde exponer a los estudiantes-futuros profesores al mayor número de herramientas con las que puedan equiparse para su tarea profesional futura. Atendiendo a esto, se consideraron para este trabajo, las afirmaciones de que el “aprendizaje activo” podría arrojar buenos resultados en la enseñanza de temas considerados complejos (Marušić & Sliško, 2014), y se procedió entonces a desarrollar la propuesta con este marco teórico.

En capítulos siguientes se presenta una estrategia para la enseñanza de tópicos de Física Contemporánea, basada en técnicas de “Aprendizaje activo” implementadas mediante tecnologías de la información.

Este capítulo pretende dar un breve panorama sobre qué es el aprendizaje activo, qué propone esta escuela para el desarrollo de una clase, y cuáles son los puntos más importantes a tener en cuenta a la hora de utilizar tecnología en el ámbito de la educación. Finalmente establece lo que serán los lineamientos y marco teórico que se tuvieron en cuenta a la hora de diseñar una estrategia de enseñanza con las restricciones y parámetros particulares que tiene el grupo de estudiantes de profesorado en el que se implementó la estrategia y esta temática en particular.

### Aprendizaje Activo.

A principios de los años 90 se popularizó este concepto de enseñanza que establece que el aprendizaje es una responsabilidad compartida donde se debe involucrar el alumno. En esta escuela metodológica sostienen que para obtener “mejores” aprendizajes, no alcanza con que el estudiante sea un sujeto pasivo en una exposición limitado a escuchar y copiar, sino que según palabras de Bonwell (Bonwell & Eison, 1991, pág. 5) debe realizar tareas de orden superior que incluyan la lectura, escritura, discusión y la participación activa en la resolución de problemas.

Según estos autores, fundadores de la escuela, el aprendizaje tradicional basado en exposición como único método de enseñanza, sería menos eficiente que la metodología que proponen (Bonwell & Eison, 1991, pág. 25). Esto no quiere decir que

los estudiantes no aprendan de la manera tradicional, ya que sabemos que lo hacen, si no que el aprendizaje logrado a través de estas actividades alcanzaría a más estudiantes, y sería más significativo para ellos.

En el entorno donde se llevó a cabo esta propuesta (instituto de nivel terciario para la formación de profesores de física), se consideró que para este tema en particular que se trabajó por fuera de las actividades convencionales y en forma de taller, podrían obtenerse mejores resultados proponiendo una metodología innovadora que motivara a los alumnos.

Es importante resaltar que no estamos postulando la ineffectividad de las clases tradicionales, que se practican ampliamente en el instituto, sino que estamos proponiendo la exploración de otros métodos de manera controlada, y a la búsqueda de mejorar los resultados que se obtienen hoy en día.

Bonwell y Eison proponen como alternativa a la exposición tradicional lo que ellos llaman “guided lecture”, es decir, exposición o clase guiada, donde se trata de evitar que los estudiantes copien compulsivamente a medida que avanza la clase y que durante una primera etapa se limiten a escuchar al docente (Bonwell & Eison, 1991, pág. 29). Durante una segunda fase se le da a los alumnos el tiempo necesario para tomar las notas que deseen luego de la exposición, en base a lo que recuerdan y a lo que fue significativo. Una última etapa consiste en la discusión con sus compañeros acerca de la clase, buscando la reconstrucción de la misma para redactar sus notas finales, poniendo en común, discutiendo y preguntando al docente cuando sea necesario.

Esta es una de las varias técnicas y estrategias que se proponen en la bibliografía específica. Las tareas más importantes a lograr son la producción escrita, aunque sea como resultado de pequeñas tareas de escritura, la resolución de problemas, reformulación de conceptos y sobre todo la discusión y debate. Es mediante la verbalización y discusión de ideas que se produce el aprendizaje, en este entorno.

Para llevar a cabo clases basadas en estos conceptos el ambiente tradicional de aprendizaje no resulta el más conveniente y numerosos autores (Alvarado, 2015), (Feldman, Medsker, & Benmouna, 2010) proponen y defienden otras topologías de aula donde se pueda favorecer este tipo de aprendizajes, como el SCALE-UP (Student-

Centered Active Learning Environment for Undergraduate Programs) con mesas redondas donde los estudiantes puedan verse las caras dentro de un grupo y computadoras de uso personal como herramienta grupal. Los artículos citados dan ejemplos de cómo el ambiente y la distribución áulica realmente modifican la dinámica de la clase y fomentan un curso centrado en el alumno.

En el campo específico de la enseñanza de la Física, este tipo de organización áulica y de trabajo en grupos se practica en el laboratorio de física, donde ya se llevaban a cabo estas prácticas anteriormente al surgimiento de la teoría.

Autores como Planinsic (Planinsic, 2010) y Marusic (Marušić & Sliško, 2014) trabajan en esta temática, planteando las ventajas de realizar pequeños experimentos como disparadores para la discusión y actividades. En esta misma línea Etkina y otros proponen todo un ambiente de aprendizaje basado en este tipo de tareas, denominado ISLE (siglas de Investigative Science Learning Environment, que en castellano sería algo así como ambiente de aprendizaje en ciencias por investigación) (Etkina & Van Heuvelen, 2007).

Lo fundamental de estas propuestas, a un nivel general, es que el estudiante se involucre más allá de simplemente “escuchar la clase” y que el énfasis no esté tanto en la transmisión de información como en el desarrollo de habilidades por parte de los alumnos (Bonwell & Eison, 1991, pág. 19).

## **ISLE**

Este marco de trabajo postula que los estudiantes pueden construir gran parte de los conocimientos en Física si son guiados mediante actividades de aprendizaje activo que comprenden básicamente el ciclo mostrado en la Figura 2.1.

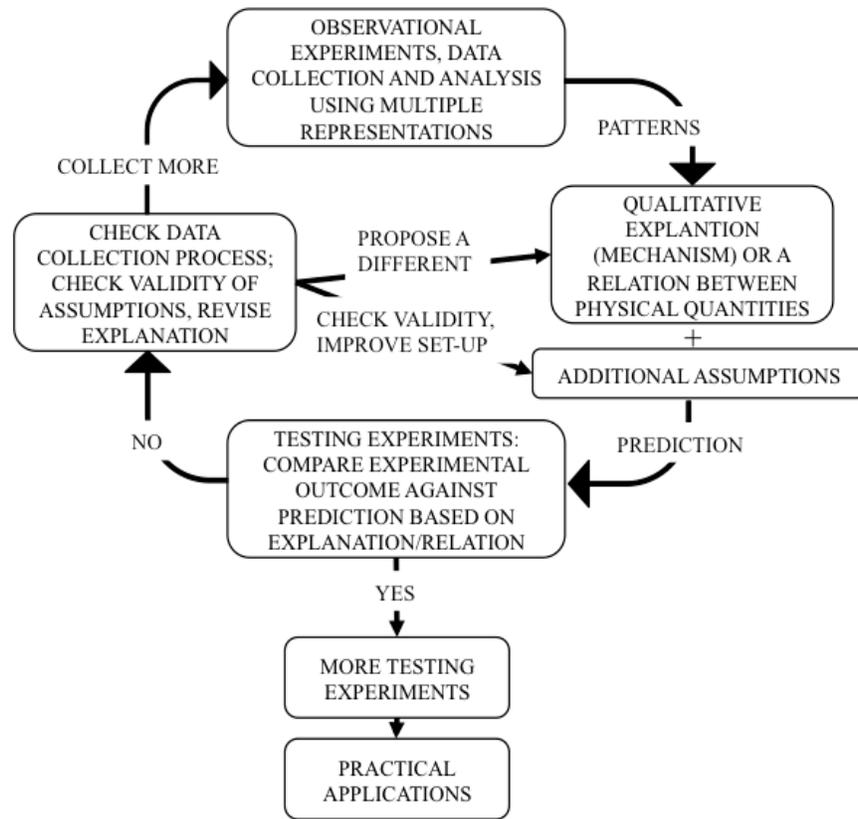


Figura 2.1 El ciclo ISLE ideado por Eugenia Etkina y Alan Van Heuvelen de la universidad de Rutgers. (Etkina & Van Heuvelen, 2004)

El ciclo ISLE comprende una primera etapa de Experimentos observacionales y recolección de datos a partir de la cual se buscan patrones. En una segunda etapa se desarrollan mecanismos hipotéticos capaces de explicar los fenómenos observados o relaciones que se ajusten con los datos medidos, explicitando las suposiciones que se realizaron para tal fin, a partir de lo cual se busca pasar a una tercera etapa donde se diseñan experimentos y se realizan predicciones para el resultado de esos experimentos según el mecanismo que se hipotetizó. Finalmente deben realizarse dichos experimentos llamados de prueba con los cuales se comparan las predicciones realizadas buscando probar la falsedad de los supuestos e hipótesis que se tuvieron en cuenta en el desarrollo del mecanismo de explicación.

A partir de los resultados de esta comparación pueden darse dos resultados diferentes. O los resultados de los experimentos de prueba se corresponden con las predicciones, o no lo hacen. En caso de no hacerlo, se debe continuar con el ciclo, pensando nuevas

explicaciones y mecanismos que puedan explicar lo observado. Si los resultados sí se corresponden, entonces se debe realizar nuevos experimentos de prueba y predicciones de sus resultados que permitan fortalecer la teoría construida.

El último paso de este ciclo es utilizar las ideas que pasaron las pruebas para acercar los conceptos físicos a la realidad de los estudiantes. Se deben explicar, inventar o describir aplicaciones prácticas que transformen este proceso científico en algo concreto y cercano a la realidad.

Este ciclo reproduce algunas de las prácticas científicas que definen a la ciencia. Según (Etkina & Van Heuvelen, 2007) “los alumnos aprenden que las explicaciones no pueden ser probadas, solo rechazadas. Consecuentemente, el mejor experimento de prueba es aquel cuyos resultados se pueden predecir de manera diferente según diferentes modelos en competencia”.

A partir de modelos hipotéticos se diseñan experimentos que son capaces de destruir dichos modelos si sus resultados no pueden ser predichos por los mismos. Se revisan y descartan explicaciones constantemente y muchas veces los experimentos revelan aspectos antes desconocidos que obligan a la reformulación de dichos modelos. Si los experimentos coinciden con las predicciones, esto no demuestra que las teorías de los estudiantes sean correctas, sino que las posiciona como las más plausibles de serlo. Estos experimentos pasan a ser parte de la evidencia a favor de los modelos hipotéticos, como un cinturón protector de Lakatos (Lakatos, 1983, pág. 13) que protege las suposiciones y presupuestos que se tomaron en cuenta a la hora de construir explicaciones.

Asimismo, se fomenta la participación y verbalización de los estudiantes quienes exponen ideas para someterlas a experimentos y probarlas falsas. Se favorece la representación lingüística de la Física (Etkina & Van Heuvelen, 2007, pág. 7) ya que las ideas deben ser expuestas, defendidas y refutadas de manera verbal. Este ítem es uno de los ejes principales de la secuencia didáctica desarrollada y de su evaluación.

La novedad propuesta con respecto a este ciclo, es utilizar la tecnología para reemplazar los experimentos que prueben los modelos propuestos por simulaciones y cálculos numéricos cuando los tópicos trabajados dificulten la realización de experimentos o la interpretación y recolección de datos.

El reporte de Julio Benegas sobre el 2do. Taller Regional del Cono Sur sobre Aprendizaje Activo y la 2da. Conferencia Regional del Cono Sur sobre Aprendizaje Activo de la Física (CRAAF-2) del 2009 ya proponía como uno de los desafíos futuros el “Adquirir experiencia práctica en la utilización de las nuevas tecnologías de información y comunicación (TICs) como sensores, interfases, computadoras, análisis de videos, simulaciones por Internet, etc., todas ellas al servicio de modernos y efectivos métodos de enseñanza-aprendizaje de la física” por lo que la propuesta de incluir simulaciones y cálculos dentro de la etapa de experimentación se adapta perfectamente a lo planteado con respecto al aprendizaje activo (Benegas, 2009) aunque no constituye una implementación 100% fiel del modelo ISLE, ya que aunque toma los elementos principales descritos más arriba no se pueden realizar experimentos reales de manera cíclica debido a los materiales disponibles y la naturaleza microscópica de los fenómenos estudiados.

### **El proceso de modelado.**

Numerosos y reconocidos autores (Hestenes, 1987) (Greca I.M., 2002) (Etkina, Warren, & Gentile, 2006) han ideado diferentes marcos para comprender el proceso de modelado a partir de una situación real observable y han coincidido en que el modelado sería la forma óptima en la que se desarrollarían cognitivamente las ideas científicas de manera constructivista.

En este apartado no pretendemos ahondar en las discusiones epistemológicas más sutiles entre las diferencias que plantean estos autores, sino que nos enfocaremos en las similitudes que todos tienen en su análisis y utilizaremos una descripción acabada del modelo de comprensión para la resolución de problemas en física que construye Gangoso y utiliza junto con Truyol y otros (Truyol, Gangoso, & Sanjosé Lopez, 2012) (Gangoso, Truyol, Brincones, & Gattoni, 2008) para interpretar la manera en la que se incorporan cuerpos de ideas científicas que den explicación a fenómenos observados.

Básicamente podemos establecer que a partir de un fenómeno real se construye un modelo situacional puramente descriptivo que gracias a los presupuestos que se consideren, y a la búsqueda de patrones, evoluciona a un modelo conceptual que describe de manera verbal, concreta y completa al sistema. Este modelo conceptual,

mediante el análisis de datos y patrones puede (y debería) evolucionar a un modelo formal que utilice el lenguaje de las matemáticas para su descripción y que permita predecir el comportamiento completo del sistema.

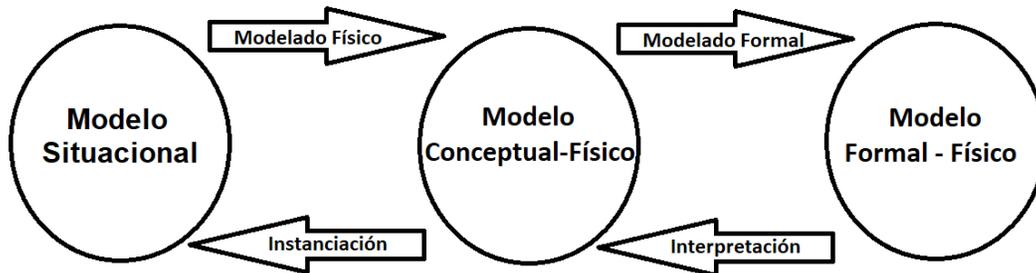


Figura 2.2 Representación esquemática del modelo de comprensión para resolución de problemas en física, según (Truyol, Gangoso, & Sanjosé Lopez, 2012), traducido del inglés. De izquierda a derecha se construyen los modelos desde un modelo situacional a uno conceptual de descripción verbal, y finalmente a uno formal matemático.

Esta actividad cognitiva de construcción de modelos ajusta perfectamente con el ciclo ISLE, y con las metodologías del aprendizaje activo, ya que es la actividad que los estudiantes deben realizar cíclicamente al predecir los resultados de los experimentos de pruebas y al construir modelos que expliquen la totalidad de los experimentos observados hasta el momento avanzando en el nivel de formalización de los mismos a medida que se recolecten nuevos datos y resultados.

### Incorporación de la tecnología

Por último, el eje de las actividades que se plantean en este trabajo, será la tecnología aplicada a la enseñanza de la Física.

Para la enseñanza de cualquier disciplina mediada con tecnología, hace falta un conocimiento que está más allá del conocimiento puramente disciplinar e incluso más allá del conocimiento disciplinar pedagógico, que se supone que es el conjunto de competencias que refieren específicamente a la enseñanza de la disciplina en cuestión. El marco TPACK (Technological Pedagogical Content Knowledge o más recientemente Technology, Pedagogy And Content Knowledge) propone la existencia de un conocimiento que refiere a las habilidades específicas de enseñanza de la disciplina, mediada con TIC. (Mishra & Koehler, 2006)

No son los mismos conocimientos los que utiliza la Física, la Enseñanza de la Física, la Física Computacional, o los que utiliza la enseñanza mediada por computadora. Cada una de estas disciplinas tiene su cuerpo de conocimientos y herramientas propias, siendo el conocimiento tecnológico-pedagógico-disciplinar el conjunto de habilidades, herramientas y competencias que refieren a la enseñanza de la disciplina Física mediada por tecnología, y es el lugar epistemológico donde se ubican las actividades realizadas y narradas en esta tesis.

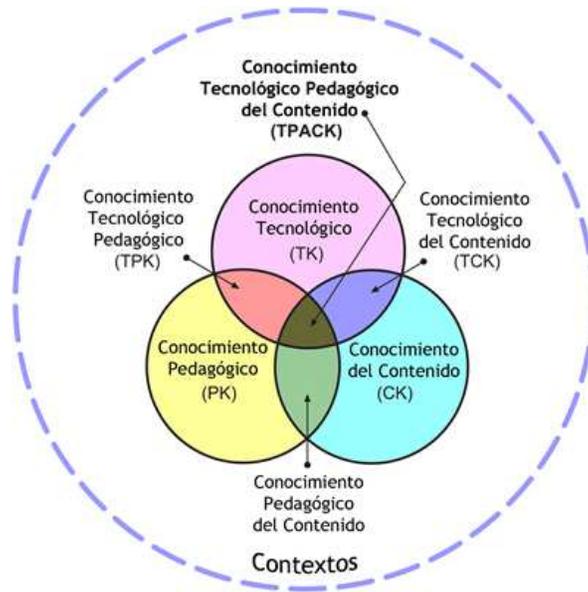


Figura 2.3 Representación gráfica del modelo TPACK, como la intersección del conocimiento tecnológico, de contenido, y pedagógico. Extraído de (Koehler & Mishra, 2009)

Las simulaciones tienen un lugar prominente en la literatura de la enseñanza de la Física y no se debatirán aquí todas las ventajas que supone su uso, aunque una frase de Gangoso ilustra claramente la metodología de uso de esta herramienta: “En la enseñanza de la física, usamos la simulación para representar un modelo que aproxima cierto aspecto de un sistema del mundo real. Se usa para generar historias artificiales de forma tal que nos permita predecir cierto aspecto del comportamiento del sistema.” (Gangoso, Clase 5: Modelado, conocimientos previos y simulaciones. Propuesta Educativa con TIC: Enseñar con TIC Física 1, Especialización docente de nivel superior en educación y TIC, 2014)

Este es el uso que se hará de la tecnología en este proyecto. Será la manera de aproximarnos a los experimentos que plantea el ciclo ISLE, y la forma de analizar un modelo formal.

### **Cap. 3. Simulaciones, scripts, y programas.**

Para el presente trabajo se desarrollaron una serie de modelos en computadora con los que los estudiantes podían interactuar en la búsqueda de conclusiones.

La plataforma utilizada fue el lenguaje Scilab 5.5. El lenguaje a utilizar fue un tema de discusión durante la primera etapa de este trabajo, debido a que la elección de una herramienta poco amable para los estudiantes, o muy específica, podía alejarlos de la propuesta. Mi director de tesis me propuso el uso de Scilab, que es un software para análisis numérico, con un lenguaje de programación de alto nivel para cálculo científico. Es una plataforma muy similar al conocido software Matlab, pero de código abierto y gratuita, lo que permite que todos los estudiantes puedan contar con el software original. Finalmente, resultó que Scilab ya venía instalado por defecto en las netbook del plan conectar igualdad (Conectar Igualdad), y por su potencial educativo resultó óptimo para nuestro caso.

Uno de los grandes logros de este trabajo fue que a partir de su desarrollo y del interés que despertó la plataforma en los alumnos, se ha modificado el programa de la asignatura Computación III del profesorado de física del INSPT para incluir la enseñanza de esta herramienta para la resolución y visualización de problemas de física general.

Algunas de las simulaciones y cálculos realizados fueron readaptados de publicaciones que describían códigos en lenguaje Matlab (software licenciado), y otros no existían con anterioridad a este trabajo.

Una importante contribución de este desarrollo a la enseñanza de la Física Contemporánea, radica en el desarrollo y la compilación de estos scripts (programas sencillos interpretados directamente sin compilación previa), y su uso orgánico en una secuencia didáctica, evitando la mera demostración.

En este capítulo se describen las generalidades de los diferentes scripts realizados, su proceso de construcción y forma de uso, encontrándose el código completo en el anexo correspondiente.

## Movimiento Browniano

La primera animación es un material específicamente desarrollado para este trabajo, y su objetivo es mostrar el movimiento de un electrón en un metal, según el modelo clásico.

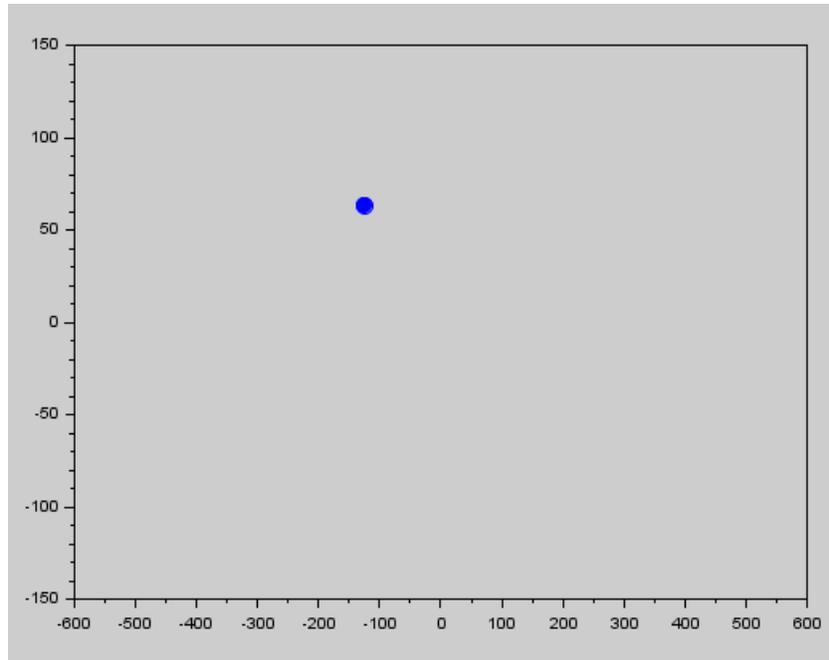


Figura 3.1 Imagen que ven los alumnos como parte de una animación. El punto azul representa un electrón en movimiento en un conductor. Las escalas son arbitrarias.

El electrón en azul se mueve aleatoriamente, ya que representa los choques elásticos con los iones que componen la red, los cuales no se dibujan. Este es el script *puntoMoviendose.sce* y lo que hace es mostrar el movimiento, conceptualmente, ya que las unidades son totalmente arbitrarias. La simulación consiste en calcular un desplazamiento mediante una función aleatoria e ir actualizando la posición anterior del electrón.

Una versión mejorada de este código se presenta en el script *electronBrownianoConceptual.sce* (Anexo 2) que plantea este mismo tipo de movimiento, pero permite al usuario ingresar la temperatura del material en kelvin, y el valor de un campo externo en V/m. El movimiento es aleatorio y las unidades del desplazamiento son nuevamente arbitrarias ya que están dimensionadas específicamente para que el movimiento del electrón se mantenga dentro de la

pantalla visible, mientras los valores de temperatura y campo externo sean normales. El objetivo es que los alumnos lo utilicen para buscar relaciones cualitativas entre los parámetros involucrados en el movimiento electrónico realizando diferentes corridas de la simulación controlando los parámetros de entrada.

### Modelo de Drude clásico

Se desarrolló un script disponible en **ConduccionClasica.sce** que realiza los cálculos correspondientes con este modelo. Este código es sencillo, y su funcionamiento se basa en crear los parámetros necesarios, que son constantes y datos conocidos, y llenar un vector (espacio de memoria que almacena datos en forma de arreglo unidimensional, utilizable en diferentes programas) con los valores calculados para la conductividad en función de la temperatura en Kelvin.

Para eso se establece arbitrariamente 1 Angström como radio atómico

```
r=1e-10;//radio atómico
```

Calcula la sección eficaz como una constante que solo depende de este parámetro

```
seccionEficaz=%pi*r^2;
```

Establece el camino libre medio, únicamente dependiente de la densidad de portadores de carga  $n$ , y la sección eficaz.

```
l=1/(n*seccionEficaz);//recorrido libre medio clásico
```

Define el tiempo de relajación como la inversa de la velocidad media, que es un vector y fue calculada de modo clásico utilizando la estadística de Maxwell Boltzmann por lo que es proporcional a la raíz cuadrada de la temperatura, y por lo tanto también es un vector.

```
vmedia=sqrt(8*T*kboltz/(%pi*masa));  
tao=l./vmedia;//tiempo de relajación.
```

Y con estos parámetros ya definidos, calcula la conductividad como el producto de la concentración de portadores  $n$ , el tiempo de relajación  $\tau$ , el cuadrado de la carga elemental  $e$ , y la inversa de la masa del electrón  $m_e$ . Además se calcula la conductividad térmica clásica, y el número de Lorentz para poder graficar y comparar.

```
conductividad=n*e*e*tao/me;  
j=conductividad*Efield;//j densidad de corriente  
KconductividadTermica=0.5*vmedia*n*l*kboltz;  
LorentzNnbr=KconductividadTermica./(conductividad.*Tabs);  
4*kboltz^2/(%pi*e^2)
```

Como se puede ver en el código, el mismo es bastante transparente al alumno, una vez que se comprenden los nombres de los variables y se familiariza con el uso de la consola de Scilab.

Las gráficas que se obtienen con estos cálculos son buenas, ya que permiten ver la relación funcional entre variables y están calculadas con toda la precisión del modelo teórico, al mismo tiempo que permiten a los alumnos evaluar la discrepancia con los datos experimentales. Por ejemplo, en la Figura 3.2 se observa que la conductividad calculada para el cobre a temperatura ambiente es del orden de  $1 \cdot 10^7$  siemens, mientras que los datos experimentales a 292K estipulan  $5,95 \cdot 10^7$  siemens. (Georgia State University)

Lo mismo ocurre con el número de Lorentz, que en el script es bastante constante y del orden de  $9,48 \cdot 10^{-9} \text{ W} \cdot \Omega / \text{K}^2$  mientras que el valor de tabla para el cobre es del orden de  $2,3 \cdot 10^{-8} \text{ W} \cdot \Omega / \text{K}^2$  (Georgia State University).

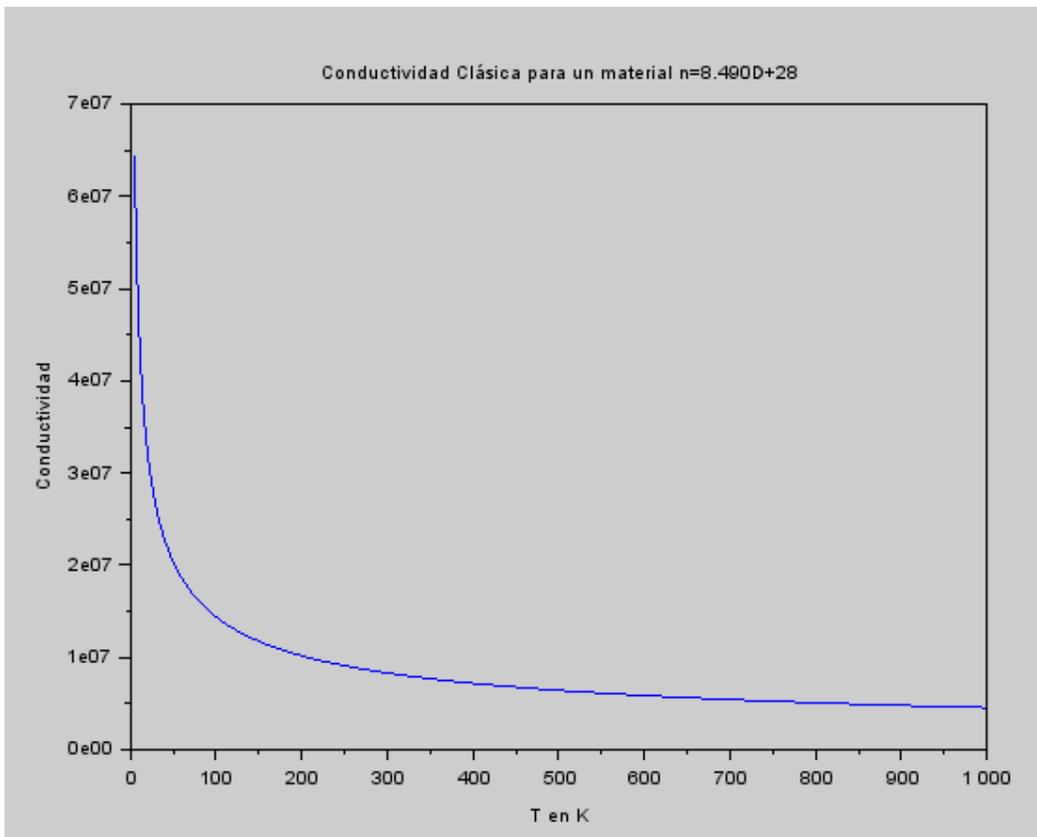


Figura 3.2 Se observa la conductividad en siemens en función de la temperatura en K calculada por el script para un material con  $8,49 \cdot 10^{28}$  portadores de carga libres por cada  $\text{m}^3$

## Estadística de Fermi-Dirac

Los scripts desarrollados para trabajar este tema son sumamente simples, y su objetivo es brindar un soporte gráfico y de cálculo para los estudiantes. Se les brinda un apoyo gráfico para que observen la forma de la distribución y su modificación con respecto a la temperatura. El objetivo es asociar dicho comportamiento colectivo de los electrones con el comportamiento individual de un electrón en un pozo finito de potencial, para lo que se proponen también funciones auxiliares para que los estudiantes puedan calcular el nivel de Fermi de diferentes materiales, y la velocidad media de los electrones que posean dicha energía. De esta manera se corrigen los resultados erróneos del modelo clásico ocasionados por una estimación clásica de la velocidad media de los electrones presentes en un metal, lo que ocasiona resultados imperfectos para todos los parámetros asociados como el camino libre medio y el tiempo de relajación.

```
1 kboltz=1.38066e-23; //J/K
2 hplaxnck = 6.625e-34; //J.s
3
4 hbarra=1.05457e-34; //J.s
5 Qelectron=1.6e-19;
6 me=9.11e-31; //kg
1 function [ef]=energiaDeFermi3D(n) //n es la densidad numérica 1/m3
2 .....
3 ... energiaJoules=((n^(2/3.0))*((3/pi)^(2/3))*hplaxnck^2)/(8*me); //un cm de largo, el primer nivel solo
4 ... ef=energiaJoules/1.6e-19;
5 .....
6 endfunction
1 function [ef]=energiaDeFermi1D(n) //n es la densidad numérica 1/m3
2 ... NSobreL=(n)^(1/3);
3 ... efJoules=((NSobreL)^2)*hplaxnck^2/(32*me); //un cm de largo, el primer nivel solo
4 ... ef=efJoules/1.6e-19;
5 endfunction
1 function [velocidadMporS]=velocidadDeFermi(energiaEnEV)
2 ... velocidadMporS=(2*energiaEnEV*(1.6e-19)/me)^0.5;
3 endfunction
```

Figura 3.3 Este código muestra las expresiones matemáticas desarrolladas en el capítulo 1, que dada la densidad numérica de conductores de un material, permiten calcular la energía de Fermi en caso de que el material sea considerado unidimensional o tridimensional. Para ello se utilizan las expresiones planteadas en (Eisberg & Resnick, 2000) (Tipler, 1981). En función de esta energía es posible calcular la velocidad asociada para las partículas. El objetivo de estas funciones es facilitar la tarea de los estudiantes, quienes tardan mucho tiempo en realizar cálculos colocando todas las constantes correspondientes.

### Modelo de Einstein de un sólido.

Sin entrar en detalles sobre este modelo, para completar el modelo del gas de Fermi es necesario corregir la ecuación desarrollada para el camino libre medio, para lo que es necesario utilizar el modelo de Einstein para el movimiento de los iones que permite estimar mejores valores para la sección eficaz de los iones.

Los iones serán osciladores armónicos que oscilarán todos a la misma frecuencia, la cuál es directamente dependiente de la temperatura del material. Para ello se escribió una función auxiliar que facilita el cálculo por parte de los alumnos, aunque esta función solo se utiliza de manera auxiliar, sin especificarse, por ejemplo, el origen de la temperatura de Einstein la cuál se entrega como dato a los alumnos y se indica como constante propia de cada material.

```
1 function [r2]=longitudOscilacionION2(masaAtomicaIon, n, T, Teinstein)
2     ... c=3e8; //m/s
3     ... mNucleon=1.67e-27; //masa aproximada nucleon
4     ... r2=2*T*(hbarra^2) / (mNucleon*masaAtomicaIon*kboltz*Teinstein^2);
5 endfunction
```

Figura 3.4 Función que permite calcular la longitud de una oscilación de un ion determinado ya elevada al cuadrado, para facilitar el cálculo de la sección eficaz de dicho ion.  $r^2 = 2 \cdot T \cdot \frac{h^2}{M \cdot k \cdot T_E^2}$  siendo  $T_E$  la temperatura de Einstein, que es un parámetro empírico y característico de cada material para este modelo.

La expresión no se trabaja en profundidad en esta secuencia, por lo que los cálculos están contenidos en el script y sólo se les presentan a los alumnos para que conozcan otros modelos a tener en cuenta en la descripción de un sólido y la complejidad involucrada en cualquier modelo que arroje resultados que ajustan a valores reales.

No se realizan interpretaciones referidas a los fonones ni se mencionan otros modelos como el de Debye, quedando estas temáticas abiertas a una futura secuencia.

### Mecánica Cuántica – Ecuación de Schrödinger

En cuanto a los modelos cuánticos, el programa que se realizó para este trabajo resuelve la ecuación de Schrödinger (1. 27) para diferentes configuraciones de energía potencial.

La resolución de este problema no es un aporte original en sí mismo ya que se pueden encontrar numerosos métodos y códigos para esta resolución (Udaf, Reedera, Velmrea, & Harrisonh, 2006).

De todos los métodos existentes en la bibliografía, por una cuestión de simplicidad en el código, se optó por la resolución que supone plantear una ecuación lineal de autovectores, de la manera planteada en (García, Zozulya, & Stickney, 2008).

Los autores escriben la ecuación de Schrödinger, como una ecuación diferencial matricial, que puede ser resuelta numéricamente con una función incorporada en el lenguaje Matlab, aunque para este trabajo se adaptó el código al lenguaje Scilab que es muy similar y posee las mismas funcionalidades a través de la función *spec* pero con una licencia abierta. La función *spec* resuelve los autovalores y autovectores de ecuaciones matriciales mediante el uso de las rutinas Lapack DGEEV, ZGEEV, DSYEV y ZHEEV, dependiendo de la simetría de la matriz.

Para obtener los autovalores de una matriz hermítica, se puede plantear una ecuación matricial de la siguiente manera:  $\hat{A} \cdot \vec{x} = \lambda \cdot \vec{x}$  siendo  $A$  una matriz hermítica,  $x$  un vector propio de dicha matriz y  $\lambda$  un valor propio o autovalor.

$A$  es una matriz cuadrada de  $N \times N$ ,  $x$  un vector de  $N \times 1$  y  $\lambda$  un escalar. Esta ecuación es válida para varios conjuntos de vectores  $x$  y escalares  $\lambda$ , los cuales son llamados autovectores y autovalores, o vectores propios y valores propios.

Puede ocurrir que esta ecuación no tenga solución para cualquier valor de  $\lambda$ .

Los autovalores pueden ser un conjunto discreto o continuo de valores o una mezcla: valores discretos en un cierto rango y valores continuos en otro.

En este trabajo, la ecuación que se busca resolver es (1. 27) reescrita de manera vectorial, obteniéndose (3. 1) siendo  $H$  la matriz que representa el operador Hamiltoniano, la letra griega  $\psi$  el vector que representa a la función de onda del electrón, y  $E$  el autovalor asociado al operador Hamiltoniano, es decir la energía del sistema. Lo que se obtendrá es un conjunto de funciones  $\psi$  que resuelven esta ecuación, junto con un conjunto de autovalores  $E$  asociados para los cuales la ecuación tiene validez.

$$\hat{H} \cdot \psi(x) = E \cdot \psi(x) \tag{3. 1}$$

Para resolver la ecuación diferencial numéricamente, se utiliza el método de las diferencias finitas para calcular las derivadas y construir un operador matricial, que

luego mediante el procesamiento y funciones incorporadas de scilab se resuelve hallando sus autovectores y autovalores.

El operador Hamiltoniano se define según (1. 25), de esta manera se debe configurar correctamente la matriz que compone el Hamiltoniano con los números que representen el operador derivada doble con respecto a la posición, las constantes correspondientes, y luego sumar la matriz con los datos del potencial en cuestión. Por último se ejecuta la operación que viene incluida en el lenguaje y este devuelve los resultados.

Entonces, las funciones incorporadas en scilab, de ser llamadas apropiadamente, calculan los valores de  $E$  y las funciones de onda que le dan sentido a la ecuación particular. Para armar el operador Hamiltoniano, que está compuesto por la derivada segunda en función de la posición, en Scilab, se utilizó el operador Laplaciano matricial definido para una sola dimensión, que no es más que la derivada doble en función de la coordenada. Para esto se puede ver la matriz planteada por (Patricio Cordero, 2013) en la Figura 3.5.

$$\begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -2 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -2 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & & & & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \\ u_5 \\ \vdots \\ u_{n-1} \\ u_n \end{pmatrix} = h^2 \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \\ f_4 \\ f_5 \\ \vdots \\ f_{n-1} \\ f_n \end{pmatrix}.$$

Figura 3.5 Ecuación matricial. La matriz de la izquierda representa el operador Laplaciano en una dimensión, o derivada doble con respecto a la posición siempre y cuando se dividan todos los elementos por  $h$  cuadrado siendo  $h$  el paso numérico sobre la coordenada  $x$ .

Esta matriz cuadrada calcula la derivada segunda de la función numérica cuyo vector se posee mediante diferencias entre los valores de dicha función, como se puede ver en (Martinez-Avedaño, 2014) y a continuación:

$$\frac{d^2y(a)}{dx^2} \cong \frac{y(a+h) - 2 \cdot y(a) + y(a-h)}{h^2} \quad (3. 2)$$

A este Laplaciano, es necesario agregarle las condiciones de Dirichlet para establecer las condiciones de borde que representan la necesidad de que la función de onda que resuelva el problema tienda a cero en sus extremos, condición que para nosotros se traduce como que la partícula esté confinada en la caja. Las unidades son, como sugiere la bibliografía, arbitrarias, y se define  $\hbar$  y  $m$  como 1, de forma que se reduzcan lo más posible los errores de redondeo (García, Zozulya, & Stickney, 2008, pág. 3).

Posteriormente, se multiplica esta matriz elemento a elemento por el escalar que en este caso valdrá 1 y se le suma el potencial  $U(x)$  que puede tener la forma que se desee. Para construir las barreras de potencial se realizaron operaciones algebraicas elementales, para multiplicar y desplazar la función escalón de Heaviside (Zill, 2009, pág. 274). La función *barreras* (Figura 3.6) recibe el largo del espacio, la cantidad de barreras, la altura de las barreras, el vector  $x$  con el dominio de la función, y la proporción del espacio ocupado por barreras de potencial y el espacio de potencial 0.

```

1 function [Up]=barreras(L, nroBarreras, altura, x, proporcionAncho)
2     V=zeros(x);
3     V=V';
4     w=2*L/nroBarreras;//porcion de dominio para cada barrera y espacio vacío
5     ...
6     a=proporcionAncho*w;//ancho de cada barrera
7     for i=0:(nroBarreras-1) ...
8         V=V+altura*heaviside(x+nroBarreras*w/2-i*w-(w-a)/2) - altura*heaviside(x+nroBarreras*w/2-i*w-(w-a)/2-a);
9     end;
10    Up=V;
11 endfunction;

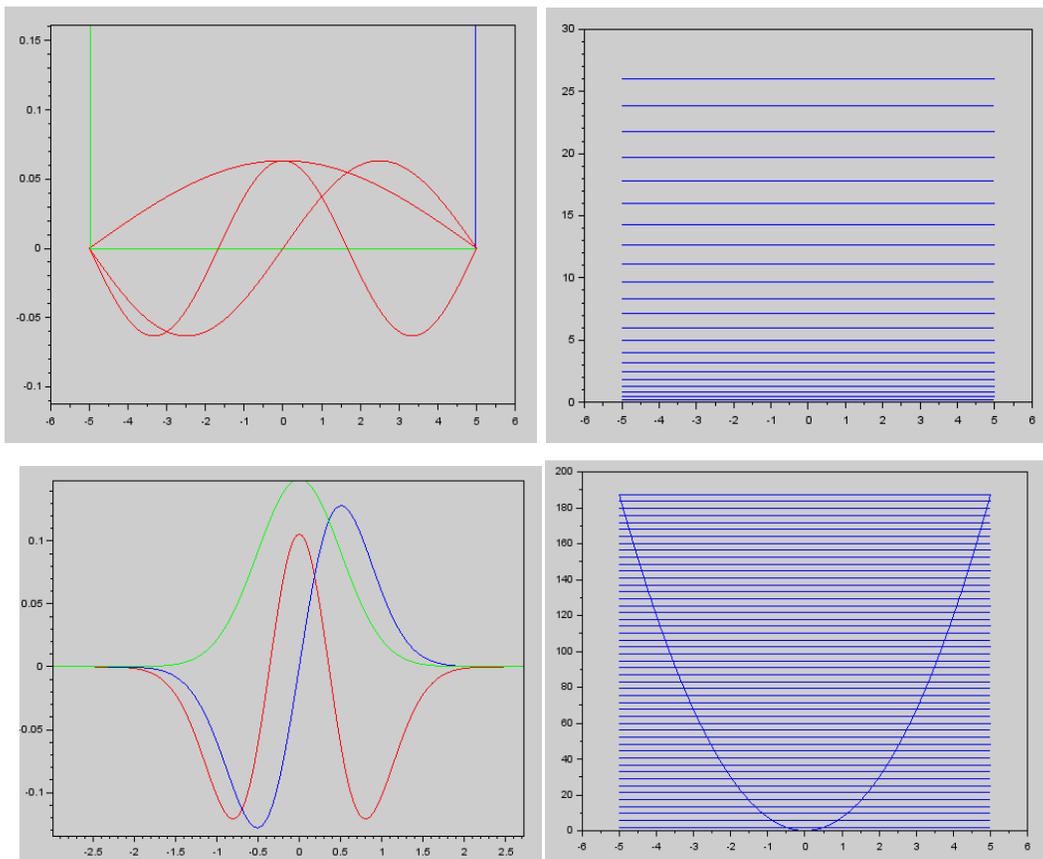
```

Figura 3.6 La imagen muestra el código que realiza los desplazamientos sobre el escalón de Heaviside para generar un vector con la cantidad de barreras que se soliciten.

La función *spec* de scilab entonces, recibe una matriz que en este caso será el Hamiltoniano completo para la situación planteada, y devuelve todos los autovalores y autovectores de esta matriz, es decir las funciones de onda y sus respectivas energías.

El script permite visualizar las funciones de onda deseadas y conocer su energía asociada ingresando el número de función que se desee visualizar, y los estados de energía en relación a los pozos de potencial y sus alturas. También permite generar una función potencial  $U(x) = 0$  y una función potencial armónico  $U(x) = \frac{1}{2}.k.x^2$  ya que la

resolución de la ecuación diferencial, en Scilab, se realiza siempre con el mismo código que encuentra autovalores y autofunciones sin modificarse el algoritmo de acuerdo a la función potencial (que es solo un sumando que compone la matriz Hamiltoniano). De esta manera se le muestra a los estudiantes la importancia de la ecuación de Schrödinger como herramienta fundamental que determina la dinámica de cualquier sistema cuántico. La energía potencial del sistema puede variar significativamente y la misma ecuación cambiará su forma y se resolverá con funciones de onda totalmente distintas con solo modificar el potencial  $U(x)$ . Determinar la forma correcta de la energía potencial del sistema, será el problema principal para obtener soluciones numéricas que indiquen el comportamiento de un sistema cuántico.



**Figura 3.7.** Las imágenes de arriba muestran a la izquierda las 3 primeras funciones de onda que resuelven la ecuación de Schrödinger para un pozo finito de potencial, y a la derecha los niveles energéticos que puede ocupar el electrón. Las imágenes de abajo muestran las funciones de onda y los niveles energéticos correspondientes a un oscilador armónico cuántico. Para obtener estos resultados se utiliza el mismo script, aunque con diferentes vectores  $U(x)$ .

El objetivo de este script, es en primera instancia, que los estudiantes observen el comportamiento de un electrón y los niveles permitidos de energía en un pozo de potencial infinito, y puedan asociar dicho modelo al electrón libre como gas de Fermi, y en segunda instancia que puedan estudiar la configuración de niveles permitidos que surge al considerar una gran cantidad de pozos (o barreras) cercanos unos a los otros.

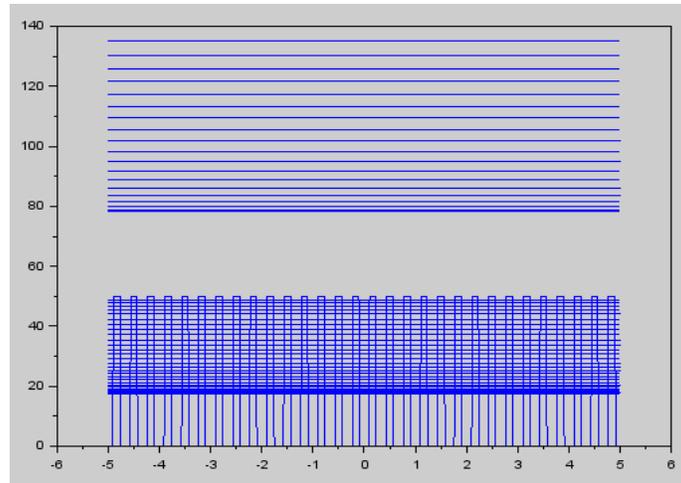


Figura 3.8 Conjunto de pozos de potencial cuadrados finitos, con los niveles de energía permitidos para un electrón separados por una “banda” de energía no permitida. Los niveles inferiores son estados ligados, mientras que los otros son niveles de “dispersión” donde la función de onda del electrón no es muy distinta que la de un electrón libre.

En la Figura 3.8 se puede ver este concepto que constituye el último modelo formal que se estudia en la secuencia didáctica, al observar la aparición de bandas de energía permitidas y no permitidas. Al realizar esta actividad de manera creciente con diferente cantidad de barreras, se puede observar cómo se van formando estas “bandas” con varios niveles discretos de energía, e interpolar este resultado con el supuesto de una cantidad de átomos o barreras muy grande, del orden del número de Avogadro, y la manera en que estas bandas formadas por varios niveles de energía se convertirían en un continuo de niveles de energía.

## Semiconductores dopados

Para el estudio de los semiconductores dopados, no se realizó ningún nuevo script, sino que se realizó una adaptación del programa anterior para modificar una única barrera de potencial, y de esta manera comparar la distribución de niveles de energía de un material con un ión diferente con la del material “puro” con todas sus barreras de la misma altura.

Este modelo permite simular, de manera conceptual, lo que sucede con los niveles de energía de un determinado material unidimensional al modificar un átomo de su configuración, sin realizar cálculos, y pudiendo observar el desplazamiento de los niveles energéticos de los límites de la banda de valencia, o de la banda de conducción según corresponda, que se mencionan en los libros de física (Eisberg & Resnick, 2000, pág. 538).

Una imagen de los resultados de dicho script puede observarse en la Figura 4.25.

## **Cap. 4. Secuencia didáctica con los estudiantes – Desarrollo y evaluación.**

Para trabajar las temáticas desarrolladas en los capítulos anteriores, se diseñaron una serie de simulaciones, programas de cálculo y actividades asociadas a estos, destinadas a favorecer el aprendizaje activo de los estudiantes de profesorado de Física utilizando tecnología informática como medio facilitador.

El grupo que participó de esta actividad estaba compuesto por 5 estudiantes regulares del curso de Física Contemporánea de tercer año del profesorado de Física del INSPT-UTN y 2 estudiantes que ya habían cursado la materia (uno ya estaba recibido de profesor de Física) en calidad de oyentes. Los 7 integrantes del grupo eran hombres, aunque respetando el perfil de los alumnos de la carrera, constituían un grupo muy heterogéneo. Todos ellos poseen una formación técnica previa (6 por la escuela secundaria y uno por terciario), cosa usual en la carrera, pero sus edades iban desde los 23 años del menor (el oyente que ya estaba recibido de profesor) a alrededor de 45 años para dos de los cursantes regulares. Uno de ellos posee un título previo de Técnico Superior en Electrónica. Los otros 4 integrantes se encontraban entre los 26 y los 36 años teniendo el menor de los estudiantes de 3º, 26 años en aquel momento, dos alumnos alrededor de 30-35 años, y el otro oyente 36 años de edad en el momento que se realizó la práctica. Este estudiante estaba cursando como oyente para preparar el examen final de la materia que estaba por vencerse. Todos los estudiantes trabajaban full time fuera del horario de cursada del instituto (que es nocturno).

Las actividades fueron conducidas por el docente y autor de este documento, y realizadas por los siete estudiantes en un grupo de tres y otro de cuatro, con dos netbooks totalmente equipadas con el software desarrollado, cartulinas y marcadores disponibles en cada uno de los dos grupos que se formaron. El grupo A se formó con 4 alumnos de 3º año, y el grupo B inicialmente se formó con los dos alumnos oyentes, al que posteriormente se agregó en el segundo encuentro uno de los alumnos de 30-35 años que había estado ausente el primer encuentro.

Los estudiantes realizaron un pre-test de manera individual y luego se involucraron en las actividades grupales. Posteriormente, además de haber sido evaluados durante el

desarrollo de la dinámica, se les consultó oralmente y vía correo electrónico por sus apreciaciones sobre esta metodología de trabajo y aprendizajes adquiridos en el proyecto.

### Resultados del pre-test

En la evaluación previa que se realizó con los estudiantes, se les realizaron las siguientes preguntas por escrito:

Test para realizar antes de la aplicación de la estrategia de enseñanza.

- a. ¿De qué manera se mueven los electrones dentro de un material y por qué lo hacen?
- b. ¿Qué diferencias hay entre el movimiento de los electrones en un material aislante y uno conductor? ¿y en un semiconductor?
- c. ¿Cuál es o cuáles son las causas de esas diferencias?
- d. ¿Qué es un modelo y qué rol cumplen los modelos en la física?
- e. ¿Qué diferencias hay entre la luz que emite un LED y la luz que emite una lamparita incandescente?
- f. ¿Cómo es el mecanismo por el cual emite luz un LED?

Las respuestas de los estudiantes revelaron que el conocimiento de los alumnos de tercer año no estaba tan estandarizado como se esperaba, pero esto refuerza la necesidad de utilizar una secuencia con muchos temas como la que se desarrolló. El número de encuestados es muy pequeño como para inferir un estado general, pero en cuanto a la descripción de este grupo se evidenció que, salvo dos excepciones, los alumnos no tenían interiorizado el concepto de bandas de energía para explicar la conductividad de un material, o al menos no recurrían a este modelo al momento de explicar sus hipótesis.

Este resultado era lógico y esperado, ya que esos contenidos no habían sido aún abordados formalmente en la carrera al momento de realizar esta actividad. El modelo al que recurren es el modelo clásico del electrón con movimiento aleatorio, correspondiente a instancias previas de la asignatura Física.

La mayoría de los estudiantes conocen la naturaleza monocromática de la luz que emiten los LED y diferencias con las lámparas incandescentes, e incluso explican el origen de la luz incandescente según el modelo de radiación del cuerpo negro.

Con excepción de un estudiante, no explican el por qué de la emisión de los LED (Uno de los estudiantes sí logró hacerlo). Por último, prácticamente todos tenían una noción del concepto de modelo físico apropiada y relacionada con una representación, una

aproximación a la realidad, o una idealización, y la idea fundamental de que todos ellos tienen límites de validez y ámbitos de aplicación.

Aunque los alumnos tenían el concepto de modelo incorporado de manera consciente, se observó que en este cuestionario no lograron hacer explícita la naturaleza provisional e incompleta del conocimiento científico al dar explicaciones según algún modelo científico particular.

### **Desarrollo de la propuesta.**

La primera actividad realizada estaba relacionada con la exploración de los modelos previos que los estudiantes tuvieran interiorizados sobre la conducción eléctrica y el movimiento de electrones en metales y/o en otros materiales.

Como primera actividad se les pidió a los estudiantes que socializaran y dibujaran en las cartulinas por grupos, sus respuestas, soluciones e ideas relacionadas con las preguntas: **“¿Cómo se mueven los electrones en un material determinado cuando hay conducción eléctrica? ¿Qué causa este movimiento? ¿Qué variables están relacionadas con este movimiento?”**.

Las ideas expresadas de esta manera, mayormente se corresponden con los conceptos clásicos de conductividad, que se pueden encontrar en los libros de texto y que fueron explicadas a principios del capítulo 1, aunque sin mencionar a Drude. Es notable que el movimiento aleatorio no fuera uno de los elementos centrales de la exposición que realizaron y que los modelos presentados tuvieran varias imprecisiones. Mayormente se alcanzó una sistematización de las cosas presentadas en los pre-test.

El grupo A, conformado por los 4 estudiantes de tercer año presentes en el primer encuentro, representó 3 casos distintos que al ser explicados verbalmente describían el movimiento o no movimiento de electrones en un tubo de vacío, el efecto fotoeléctrico, y por último, el menos científico de todos, el modelo que proponen algunos libros de texto de primaria o simulaciones como [PHET] donde los electrones se mueven como un tren de manera serial y ordenada en presencia de campo eléctrico externo.

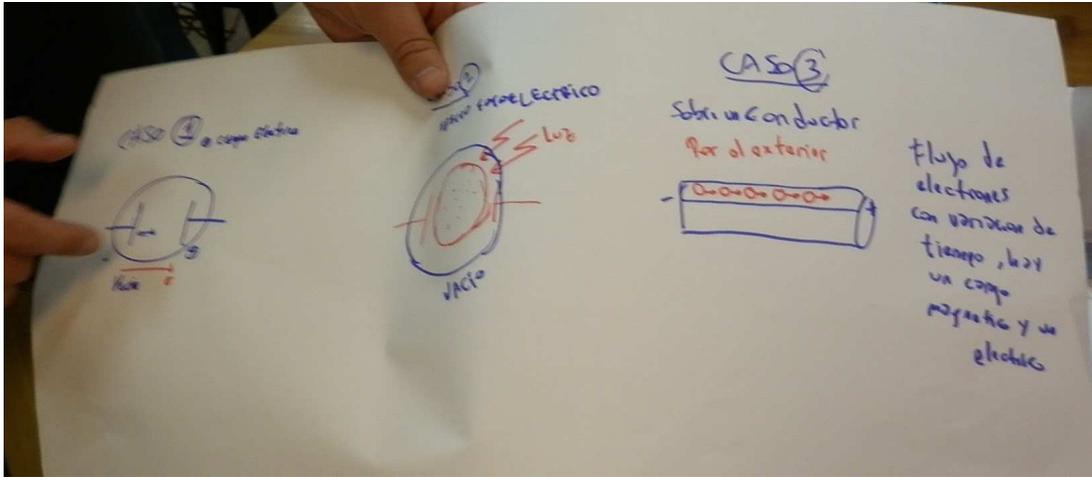


Figura 4.1 Cartulina con el resultado del trabajo del grupo A ante la primera pregunta sobre el movimiento de electrones.

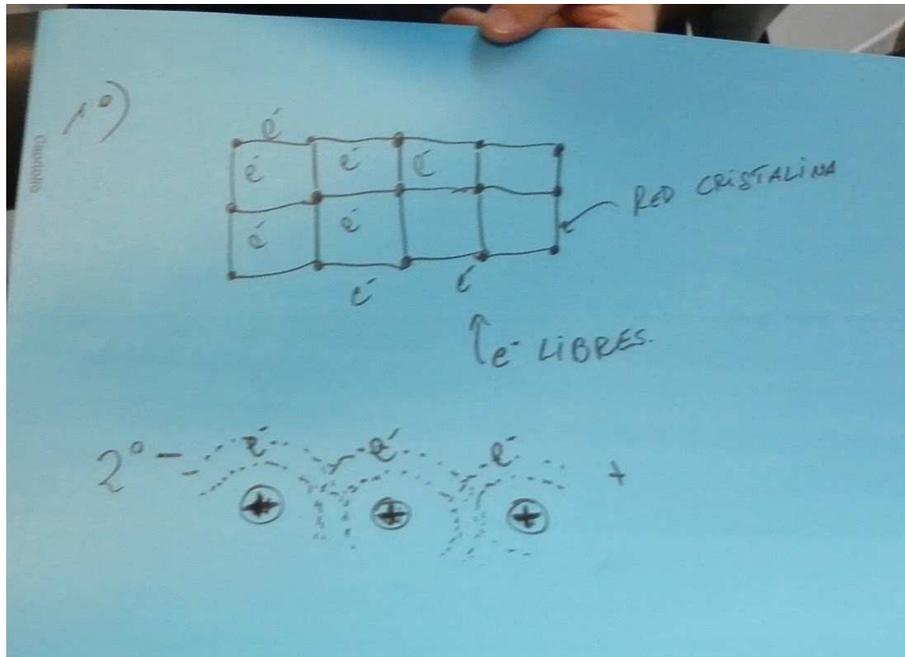


Figura 4.2 Hipótesis del movimiento de electrones en un sólido conductor del grupo B.

El grupo B, formado por ex-alumnos de la materia realizó dos representaciones referidas ambas a la estructura de un sólido, con sus iones organizados y los electrones de los niveles más externos considerados electrones libres, que poseerían libertad suficiente como para trasladarse por el cristal frente a un campo eléctrico externo. Estas explicaciones se corresponden con modelos más elaborados de la conducción.

### Aprendizaje activo y socialización de propuestas.

A partir de este punto, habiendo presentado sus representaciones e ideas alternativas respecto al tema a trabajar, se les pidió a los estudiantes que pensarán posibles experimentos imaginarios o no, que permitieran falsar o fortalecer las hipótesis presentadas según la propuesta del ciclo ISLE (Etkina & Van Heuvelen, 2004).

Estos experimentos son mentales y no se esperaba que se llevaran a cabo, si no que se buscaba utilizarlos como medio para que, al analizarlos, surgieran posibles complicaciones en los modelos planteados. De esta manera, poniendo a prueba las ideas propias y dejando que otros las analicen y cuestionen, estos modelos podían ser refinados por los mismos alumnos.

La manera en la que se plantean estos experimentos debe ser tal que permita cuestionar las hipótesis planteadas por los estudiantes. De esta manera a los alumnos se les instruyó en como deberían expresar las predicciones sobre sus modelos:

*Si la realidad es como dice mi modelo, al realizar el experimento xxxxxx, el resultado será yyyyyyy. Si no es este el resultado, entonces el modelo planteado probablemente no sea correcto o esté incompleto.*

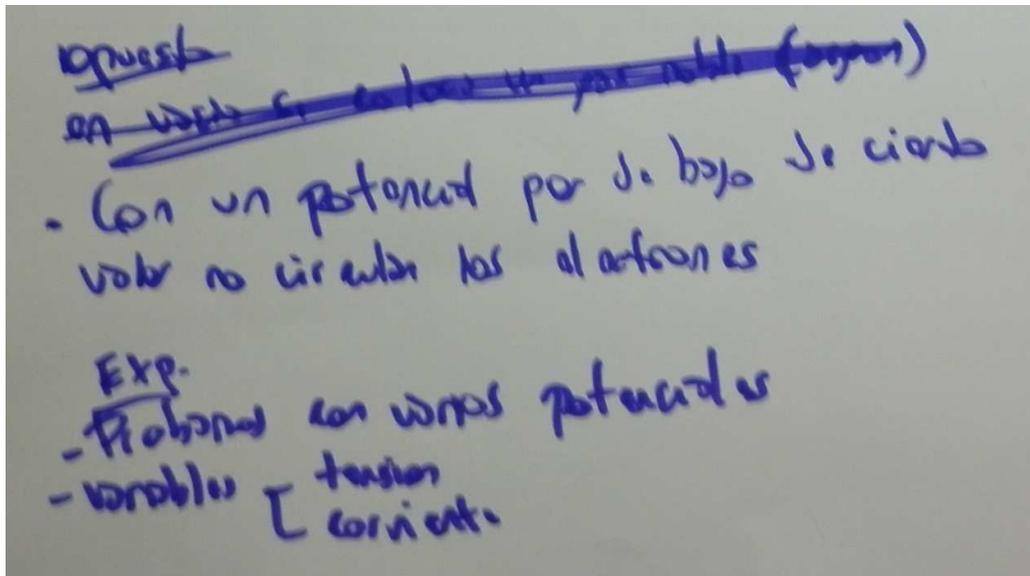


Figura 4.3 Escritura de las hipótesis y el posible experimento para probar dicha hipótesis del grupo A. “-Con un potencial debajo de cierto valor no circulan los electrones. Exp. – Probar varios potenciales. Variables: tensión. Corriente”

Los alumnos se tomaron su tiempo para plantear estos experimentos y escribirlos en la cartulina según la fórmula sugerida. El grupo A escribió entonces lo que se ve en la Figura 4.3.

La hipótesis fue “Con un potencial debajo de cierto valor no circulan los electrones”. El experimento sugerido fue *“probamos con varios potenciales y medimos las variables tensión y corriente”*.

A pesar de que aún no se había comprendido del todo la consigna, plantearon un experimento que permitiría refutar o comprobar parcialmente las hipótesis que habían realizado. Oralmente rectificaron el experimento que permitiría de acuerdo a no encontrar una corriente en los materiales que testean, descartar la hipótesis de la conducción como la imaginaron, ya que al haber una diferencia de potencial los electrones deberían moverse y ser medibles como una corriente.

El segundo grupo, en cambio, comprendió mejor la consigna y planteó el siguiente experimento: *“(Obtener) el mismo material con sus átomos alejados (en estado gaseoso). En ambos casos se aplica el mismo potencial. Si el experimento resulta positivo corrobora la suposición de zonas de conducción. Si el experimento resulta negativo (y) hay conducción, no nos brinda ninguna conclusión.”*

El segundo grupo comenzó el recorrido de poner a prueba el ciclo ISLE de manera correcta y ambos grupos comenzaron a pensar en la conducción desde el punto de vista microscópico, aunque el primer grupo lo abordó desde el punto de vista clásico.

En todo este proceso, un paso indispensable es que cuando se comparte lo que cada grupo discutió y las conclusiones a las que se arribó, no se comparte para el docente, si no para los pares, a quienes se les debe explicar de manera clara los razonamientos que se siguieron. En esta actividad se ponen en juego varias competencias deseables en los futuros docentes de ciencias como las habilidades de exponer una idea, defenderla, y ejemplificar.

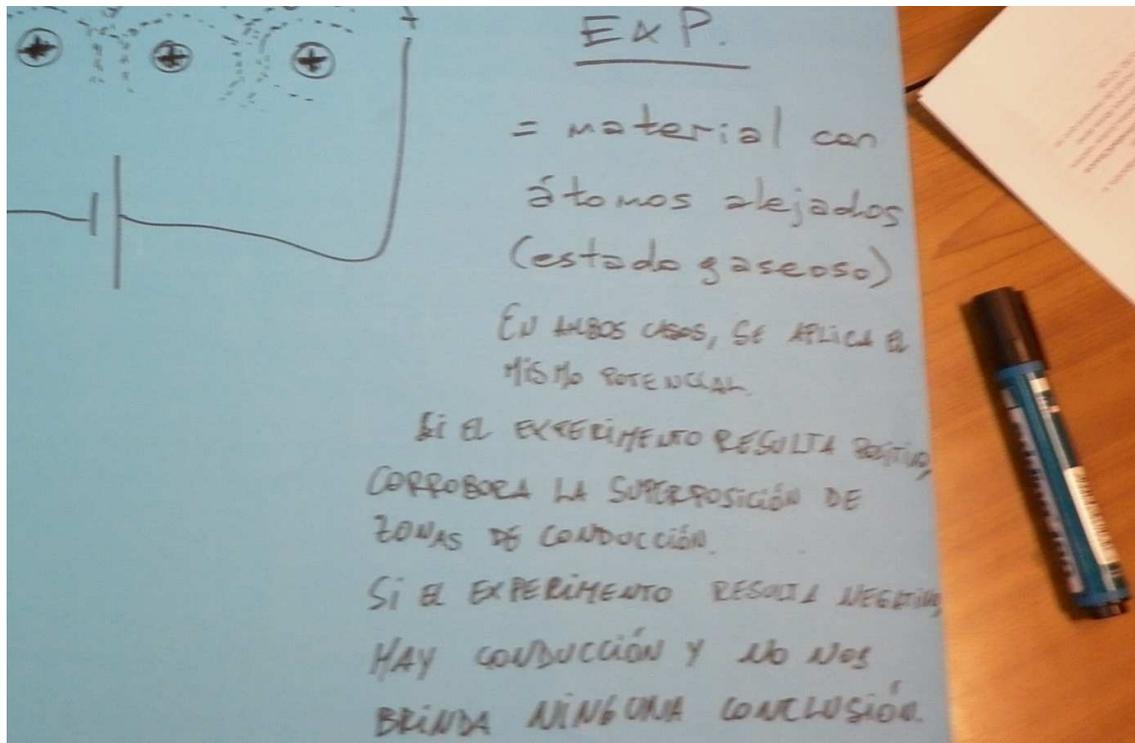


Figura 4.4 Experimentos (mentales) planteados por el grupo B. "Exp. = material con átomos alejados (estado gaseoso) en ambos se aplica el mismo potencial. Si el experimento resulta positivo, corrobora la superposición de zonas de conducción. Si el experimento resulta negativo, hay conducción y no nos brinda ninguna conclusión."

(sic)

## Experimentos en computadora

A partir de estas suposiciones que se realizaron, se les pidió a los estudiantes que ejecutaran un programa de computadora desarrollado específicamente para esta unidad denominado **electronBrownianoConceptual.sce** (código disponible en el anexo 2) utilizando diferentes valores para la temperatura y para el campo eléctrico.

Esta simulación permite visualizar el movimiento de un electrón modelado como una partícula con movimiento térmico que choca elásticamente con los iones de la red, y que además es acelerado por un campo eléctrico externo que ocasiona un movimiento neto en la dirección contraria al campo, con una velocidad de deriva resultante.

La simulación arroja los resultados numéricos de desplazamiento neto, movimiento neto en el eje x, y recorrido libre medio entre choques. Las unidades en las que calcula estos resultados son arbitrarias, ya que lo que se busca es que los estudiantes

observen una relación causal, pero no necesariamente relación numérica entre variables.

Se les pidió a los alumnos que hagan explícitas y verbalicen las relaciones que observaban.

De esta manera los estudiantes observaron que los resultados eran aleatorios, y que podían cambiar para los mismos parámetros de entrada, y concluyeron que existen dos componentes del movimiento: una aleatoria que depende solo de la temperatura, y un movimiento que ellos llamaron “de traslación” que depende del campo eléctrico externo. Para hacer esto, realizaron el experimento controlando una o la otra variable sucesivamente (ver Figura 4.5), y como se puede ver, en un primer momento buscaron relaciones cuantitativas que luego resumieron en conclusiones cualitativas.

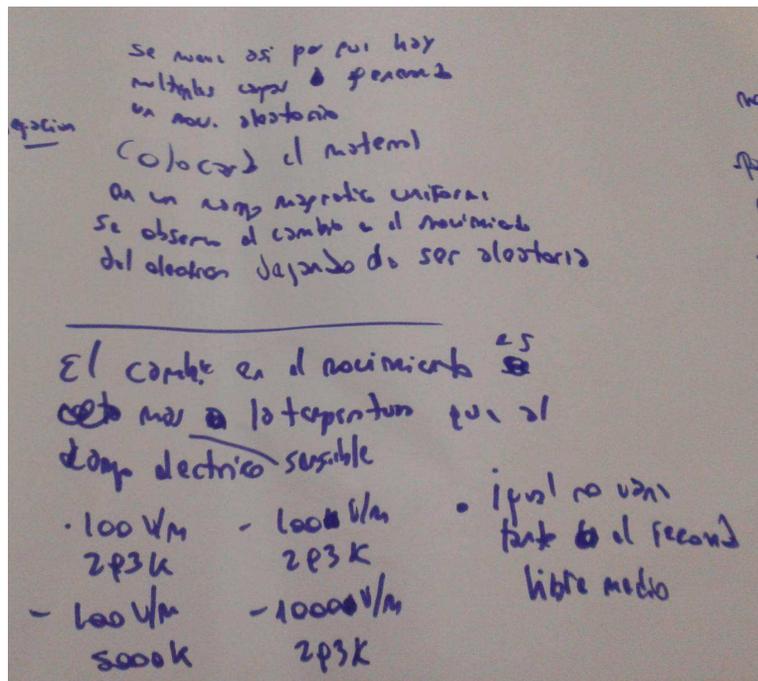


Figura 4.5 Demuestra la cartulina con las observaciones realizadas por el grupo A con la simulación de movimiento browniano conceptual. Se lee: “Se mueve así porque hay múltiples campos generando un mov. aleatorio. Negación Colocar el material en un campo magnético uniforme. Se observa el cambio en el movimiento del electrón dejando de ser aleatorio.” Abajo se ve una tabla con relaciones numéricas entre los resultados y los parámetros

Es cierto que en materias anteriores los estudiantes habían trabajado con conceptos como el camino libre medio, pero se observó en las declaraciones que realizaban durante esta actividad y las conversaciones que tenían entre ellos dentro de los grupos

que formaron, que la mayoría tenía asimilado este concepto de una manera conceptual pero no algebraica.

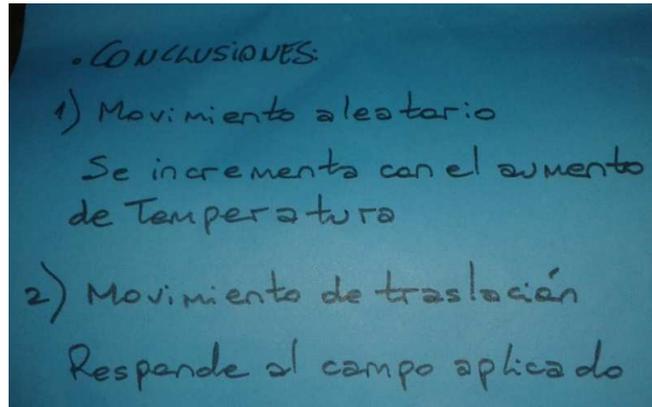


Figura 4.6 Conclusiones a las que arribaron los integrantes del grupo B. "1) Movimiento aleatorio. Se incrementa con el aumento de Temperatura. 2) Movimiento de traslación. Responde al campo aplicado"

Luego de esta actividad y de la puesta en común se procede a una etapa de formalización donde se definen los conceptos clásicos de camino libre medio, tiempo de relajación y los otros parámetros del modelo de Drude, de la manera que está explicado en el capítulo 1 ya que el objetivo de esta actividad para los estudiantes era solo la obtención de las relaciones cualitativas.

### Conducción clásica y modelo de Drude.

Una vez expuesto el modelo de Drude, cabe analizar los resultados que este arroja, para lo cual se les pidió a los estudiantes que ejecutaran el script **ConduccionClasica.sce** que establece las constantes y las funciones que se utilizan para realizar los cálculos correspondientes al modelo estudiado. En la Figura 4.7 se pueden ver los valores que surgen de dicho script, en su gran mayoría expresados en las unidades del sistema internacional.

Explorador de variables		
	Nombre	Value
<input type="checkbox"/>	Qelectron	1.6e-19
<input type="checkbox"/>	hbarra	1.05e-34
<input type="checkbox"/>	hplaxnck	6.62e-34
<input type="checkbox"/>	me	9.11e-31
<input type="checkbox"/>	e	1.6e-19
<input type="checkbox"/>	Efield	3
<input type="checkbox"/>	kboltz	1.38e-23
<input type="checkbox"/>	nAluminio	1.81e+29
<input type="checkbox"/>	nOro	5.9e+28
<input type="checkbox"/>	nCobre	8.49e+28
<input type="checkbox"/>	demolistlock	6.54e-310

Figura 4.7 Tabla de scilab. Valores de constantes cargadas por el script `ConduccionClasica.sce`

Con estas variables expresadas se les pidió a los estudiantes que ejecutaran la función ***conductividadClasica*** pasándole como parámetro la densidad numérica de conductores libres, o concentración de cualquier metal, recomendándose los que ya están preestablecidos en el script.

Para ver los resultados que se obtienen en detalle, se puede consultar el capítulo 3 aunque en la Figura 4.8 se puede observar al menos la forma de los resultados que se obtienen para la conductividad y el número de Lorentz en función de la temperatura (izquierda y derecha).

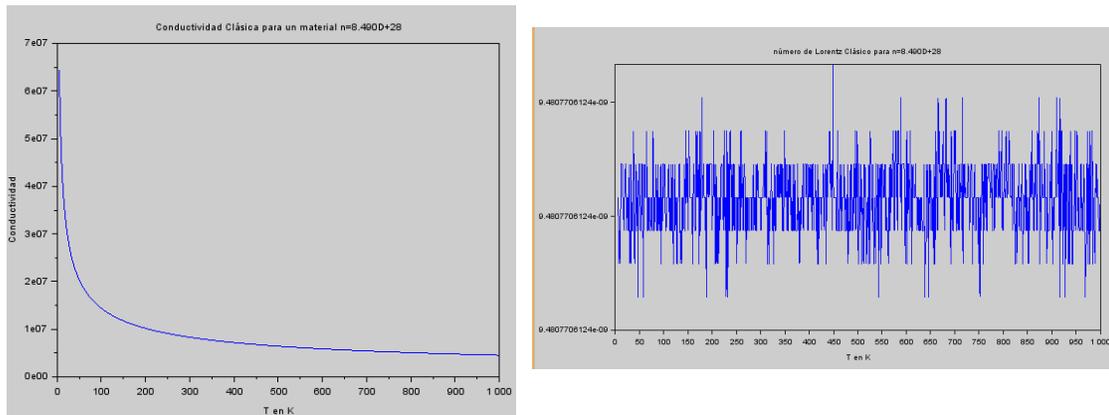


Figura 4.8 En la izquierda se ve la conductividad del cobre en función de la temperatura expresado en siemens según el modelo clásico. Los valores no son apropiados, pero la forma funcional es adecuada. A la derecha se ven las fluctuaciones en el número de Lorentz con respecto a la temperatura también para este modelo. Las fluctuaciones son mínimas, como lo indica el eje y como predice el modelo, pero su valor difiere en más de un orden de magnitud respecto al obtenido por modelos más refinados.

La forma de la gráfica de la conductividad en función de la temperatura es adecuada, y la gráfica del número de Lorentz permite ver que las fluctuaciones en el número calculado son ínfimas, por lo que el número es de hecho constante, aunque difiere en un orden de magnitud del valor experimental lo que indica que el modelo no es lo suficientemente completo.

A fin de continuar con el proceso de debate y conceptualización se les realizó a los estudiantes las siguientes preguntas

**¿Cómo explicar la discrepancia de este modelo?**

**¿Qué hipótesis les parece que son más erróneas en las deducciones realizadas?**

**¿Qué correcciones realizaría a esos parámetros?**

Los dos grupos de estudiantes dialogaron unos minutos y llegaron a conclusiones similares, que son las conclusiones deseadas (ver Figura 4.9 y Figura 4.10): Lo que suponían era que el problema radicaba en considerar la energía de los electrones desde un punto de vista clásico, no cuántico y que no se tuvieron en cuenta las propiedades ondulatorias de los electrones en las simulaciones presentadas.

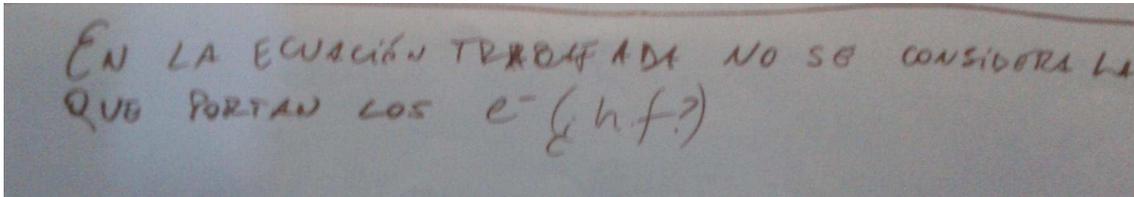


Figura 4.9 Una de las hipótesis de los estudiantes del grupo B por la cual el modelo clásico falla en sus predicciones. “En la ecuación trabajada no se considera la energía que portan los electrones ( $hf$ )”. La hipótesis es correcta aunque la expresión para la energía no sea del todo precisa.

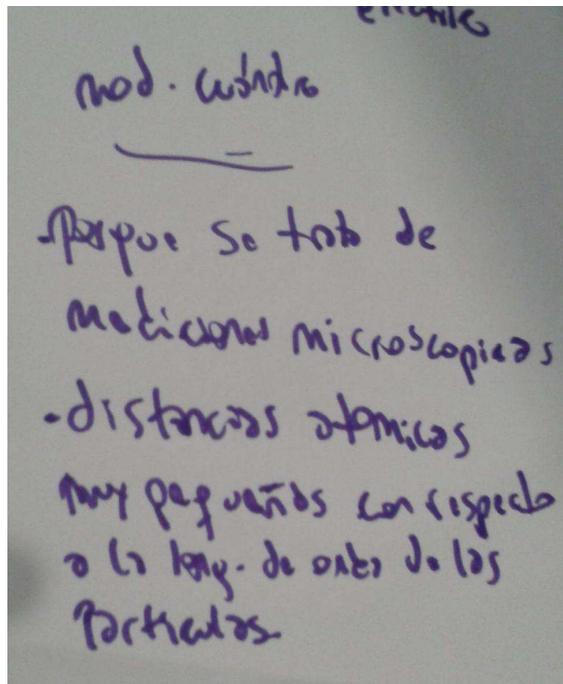


Figura 4.10 Hipótesis del grupo A que explican por qué el modelo clásico no es correcto para ellos. “Porque se trata de mediciones microscópicas. Distancias atómicas muy pequeñas con respecto a las longitudes de onda de las partículas”. Aquí también se observa que los estudiantes manejan los alcances de los modelos clásicos, de manera conceptual.

Si las distancias entre iones, son las estimadas por el modelo, entonces tendría que empezar a haber efectos relacionados con las propiedades ondulatorias de los electrones.

Estas conclusiones son valiosas, porque son conclusiones a las que arribaron los estudiantes mediante el diálogo entre ellos y el análisis de datos de los modelos construidos a los que se accede vía la computadora. Se puede ver como se superan las dificultades demostradas durante el pre-test y lo más importante, como las respuestas no son brindadas directamente por el docente, quien se comporta como un facilitador.

### Mecánica cuántica

De esta manera, entran los conocimientos nuevos en juego. Los estudiantes ya habían trabajado previamente con la ecuación de Schrödinger (1. 27) y con el problema del pozo infinito de potencial en la asignatura, por lo que se les plantea este problema modelando un trozo de material conductor como un pozo de potencial infinito

unidimensional (los electrones no pueden escapar, dato que se les aclara que es una simplificación pero que por el momento se considera adecuado).

Se les propone a los estudiantes que empiecen suponiendo que los electrones no interactúan entre sí, y están libres en el metal como se vino haciendo hasta el momento en la asignatura, pero con esa premisa se les permite visualizar el comportamiento de los electrones en el pozo. Para eso se les solicitó que ejecutaran la función **pozoInfinito()**; El resultado de los niveles de energía para el pozo infinito no es  $E=h.f$  como propuso un conjunto de alumnos (ver Figura 4.9), sino que es la establecida en la ecuación (1. 33). Los estudiantes aceptaron en seguida su equivocación al ejecutar la simulación.

Se les permitió a los estudiantes comparar el resultado algebraico con los autoestados calculados numéricamente que arroja la función, además de visualizar la función de onda que deseen.

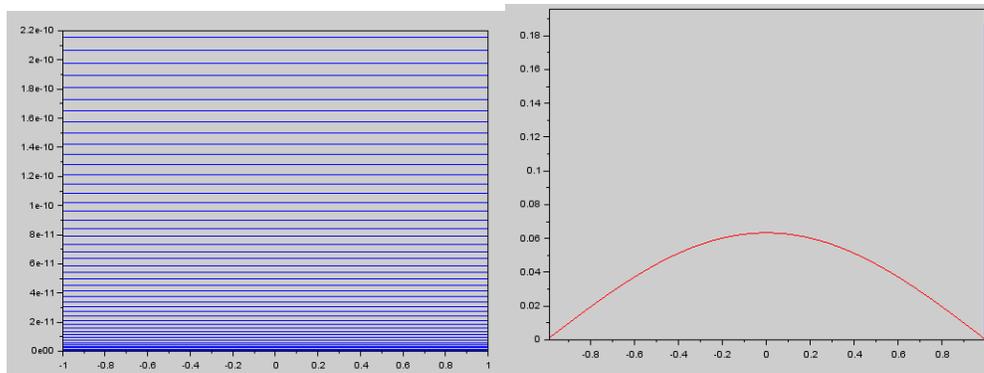


Figura 4.11 Pozo infinito de potencial. A la izquierda los niveles que responden a la fórmula (1. 33) y a la derecha la función de onda asociada al valor energético más bajo, en función de  $x$ .

Los electrones son además de partículas, ondas, y tienen propiedades nuevas como el spin. La estadística que se aplica a las partículas cuánticas es estadística cuántica, como la estadística de Bose-Einstein, o la estadística de Fermi-Dirac, presentada durante el capítulo 1. Es por esto que la estadística de Maxwell-Boltzmann, que modela el comportamiento colectivo de grandes números de partículas clásicas y se utilizó para definir los parámetros del modelo de Drude, no sería suficiente.

Los electrones tienen spin  $\frac{1}{2}$ , esto quiere decir que un electrón en particular puede tener un número cuántico para el spin  $m_s = \frac{1}{2}$  o  $m_s = -\frac{1}{2}$  por lo que cumplen con el Principio de Exclusión de Pauli, que establece que dos de estas partículas a las que se

Los fermiones no pueden tener los mismos números cuánticos al mismo tiempo. La estadística que se aplica entonces es la estadística de Fermi-Dirac y en el pozo de potencial infinito unidimensional, los únicos números cuánticos serían el  $n$  que establece el nivel energético donde se encuentra el electrón, y  $m_s$  que representa al spin.

Esta estadística establece entonces que en determinado nivel de energía puedo llegar a encontrar dos partículas: una con spin  $+\frac{1}{2}$  y otra con spin  $-\frac{1}{2}$  (o spin arriba y abajo), cosa muy distinta a lo que encontraría suponiendo partículas clásicas donde nada impide que haya dos de estas que se muevan exactamente a la misma velocidad y con la misma energía, resultado imposible en la mecánica cuántica. Con estas explicaciones en mente, se formalizó la teoría para escribir la estadística de Fermi-Dirac con los estudiantes. Cabe aclarar que en esta etapa, la clase transcurrió de una manera más expositiva que participativa.

### Estadística de Fermi-Dirac

Para evaluar la forma de la distribución de Fermi-Dirac y trabajarla como un objeto concreto y modificable, se pidió a los estudiantes que ejecutaran el script ***fermiDirac.sce*** y llamen a la función ***ploteaFD()***. Esta función solicita el ingreso de la energía de Fermi en electronvolts (eV) y permite visualizar la curva correspondiente para el metal que se trabaje. Los estudiantes trabajan con el cobre y se les pide que interpreten la dependencia de la forma de la función con la energía de Fermi y la temperatura.

Se buscó una sistematización del concepto expuesto mediante la interacción de los alumnos con los objetos matemáticos y físicos.

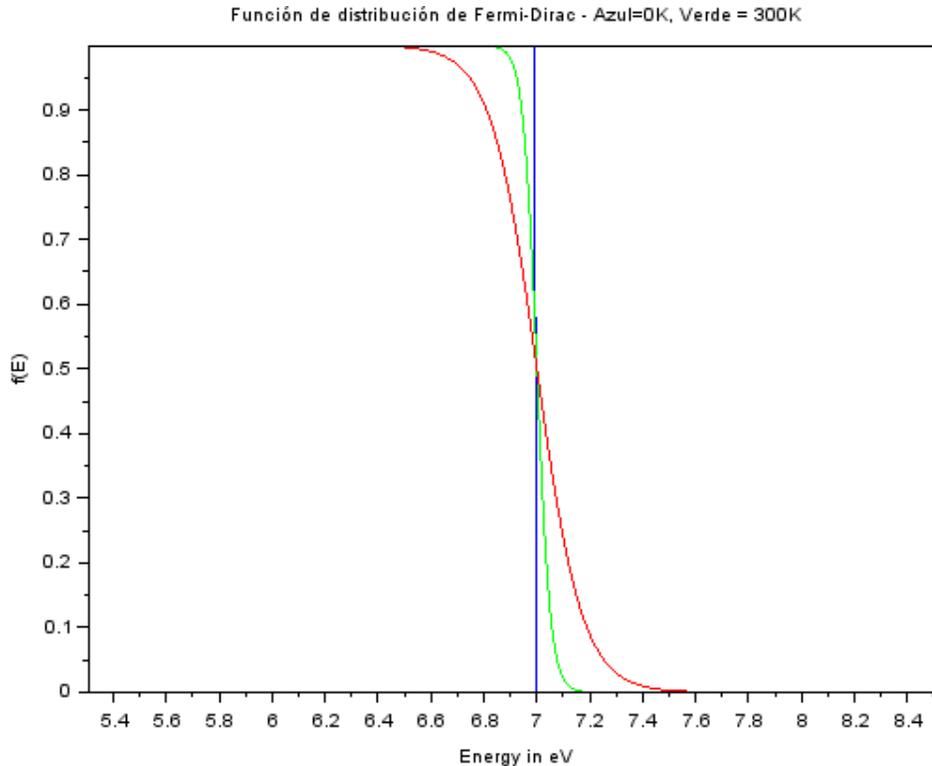


Figura 4.12 Distribución de Fermi-Dirac( $f(E)$ ). La energía está en eV, y la gráfica muestra en línea recta la distribución para  $T=0K$ , y luego las temperaturas crecientes de 300K y 500K que producen que crezca la “cola” de la distribución y la probabilidad de encontrar electrones con determinada energía mayor a la energía de Fermi.

Mediante una secuencia más tradicional donde se compararon estas gráficas con los niveles energéticos del pozo infinito, se consiguió que los estudiantes comprendiesen la idea conceptual de la distribución. Los estudiantes terminaron siendo capaces de asociar esta energía de Fermi con una energía promedio de los electrones que realmente tienen movilidad y participan de la conducción eléctrica. En esta instancia, hizo falta mayor participación docente de la que se esperaba para que los estudiantes llegaran a redondear la idea, ya que requirieron exposición pura para comprender el significado de la curva de la distribución de Fermi-Dirac.

Se les indicó también que llamaran una función para calcular la energía de Fermi en un pozo infinito (modelando el metal como un pozo infinito). Al ejecutar **energiaDeFermi1D(nCobre)** o **energiaDeFermi3D(nCobre)** y pasar la densidad numérica de electrones libres del material los alumnos obtuvieron el nivel de energía de Fermi para el material en cuestión (en este caso Cobre). Esta función combinada con la otra les permite a los estudiantes construir las curvas de distribución de los

electrones para diferentes metales unidimensionales, ya que les arroja la energía en eV que es la única entrada que pide la función que construye gráficas. Los alumnos procedieron a seguir estas actividades y comentar los resultados.

En esta instancia aparece el concepto de temperatura de Fermi, como la temperatura que tendrían que tener los electrones si toda su energía fuera del tipo térmico, y también la velocidad a la que se movería un electrón que tenga esta cantidad de energía considerando que la energía térmica de una partícula está en el orden de  $kT$  siendo  $k$  la constante de Boltzmann y  $T$  la temperatura absoluta. De esta manera se les pidió a los estudiantes que estimaran la velocidad media a la que se estarían moviendo los electrones que poseen energía en el orden de la energía de Fermi (se les propuso que ejecutaran la función **velocidadDeFermi(...)** pasando la energía de Fermi en eV. para que realizara estas cuentas por ellos) y se les preguntó qué relación tiene esta velocidad con la velocidad estimada con el modelo clásico.

Con estos datos, todos los estudiantes observaron y comentaron que la velocidad promedio de los electrones que pueden moverse es mucho más alta que la calculada en el modelo clásico. Partió de los mismos estudiantes la propuesta de reemplazar la velocidad media del modelo clásico con estas nuevas velocidades, lo cual es un logro parcial de la secuencia didáctica.

Sin realizar cálculos se reemplazó la velocidad en la ecuación y se les propuso el siguiente planteo a los estudiantes: “Si en nuestro modelo clásico consideramos que los electrones se mueven a una velocidad media que debería ser la velocidad de Fermi para ese metal, obtendríamos un nuevo modelo híbrido donde la conductividad no dependiera de la temperatura, ya que la velocidad de Fermi no depende de la temperatura si no del material”. Este concepto es anti-intuitivo para ellos y surgieron muchas dudas y cuestionamientos.

En base a los cuestionamientos anteriores se les pidió a los estudiantes que se tomaran el tiempo para pensar qué otros factores pueden llegar a cambiar para obtener una dependencia de la conductividad con la temperatura. Podían realizar pruebas sobre el modelo con todas las herramientas que se les fueron mostrado y se les pidió que escribieran y discutiesen el modelo que tenían armado hasta el momento, recopilando la información del pizarrón y de las simulaciones.

## Metales - Modelo de Fermi

En este momento de la secuencia, los estudiantes tenían en sus manos un modelo semicuántico (y su representación computacional) que considera a las partículas que producen la conducción ya no partículas de un gas, sino fermiones con características cuánticas pero en el que no se establece la relación correcta entre temperatura y conductividad, más allá de que la temperatura determina qué porcentaje de electrones tienen movilidad dentro del metal.

$$\sigma = \frac{n \cdot e^2 \cdot l}{m \cdot \bar{v} \cdot A(T)}$$
  
→  $\frac{1}{\sigma}$   
· lo conduce decrece con la temp  
tiene que ir a el denominador  
(lo cte A. esto  
en función de la temperatura

Figura 4.13 El modelo de la conductividad clásica, con el agregado que regule la dependencia con la temperatura según lo ve el grupo B. Una función  $A(t)$  en el denominador.

El planteo que realizaron algunos alumnos fue el de imaginar que hay un coeficiente que depende de la temperatura  $[A(T)]$  y que ajusta la función a los resultados experimentales. Esta explicación no es fenomenológica, sino que es matemática, y aunque no es prueba de que hayan resuelto el problema, demuestra que los estudiantes pueden usar herramientas experimentales.

Para estimular a los estudiantes a encontrar una respuesta, hubo que pedirles que se enfoquen en las partículas con las que los electrones se supone que chocan. Se les explicitó la pregunta “¿Qué le sucede a estas partículas y qué rol jugaban anteriormente?”.

Así llegaron a la necesidad de darles una sección eficaz a los iones del metal, que modificara directamente el camino libre medio de los electrones en el metal calculado clásicamente durante el modelo de Drude. En esta instancia se desarrolló una explicación superficial del modelo de Einstein de los sólidos para adecuarla a los

alumnos, modelando los iones como osciladores cuánticos, y explicitando la dependencia entre la sección eficaz y las vibraciones de los iones que dependen de la temperatura absoluta del metal como se puede ver en la puesta en común realizada en la cartulina por los estudiantes (Figura 4.15). Como una herramienta de visualización, se les mostró la naturaleza de los osciladores cuánticos utilizando los cálculos que realiza el script *mecanicaCuantica.sce* configurado para el oscilador armónico simple, imaginando que cada ión es un pequeño oscilador mecánico-cuántico. (Ver estados de energía y funciones de onda en Figura 4.14)

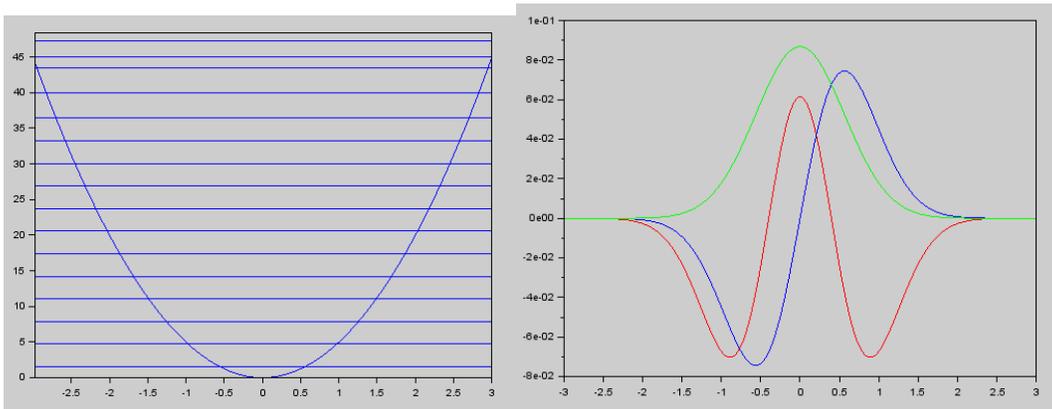


Figura 4.14 A la izquierda, la energía potencial del oscilador mecánico cuántico, junto con los niveles permitidos para una partícula en este potencial. Vease que los estados son equi-espaciados. A la derecha, las primeras 3 funciones de onda, correspondientes a los 3 niveles de energía más bajos.

Para esta actividad, hubo que optar por otra metodología de enseñanza, ya que el aprendizaje activo puro fue insuficiente, y no se pudo llevar a los estudiantes a desarrollar ellos mismos el modelo. De todas formas, se les dio la oportunidad de reinterpretar el modelo y explicitarlo con sus propias palabras para una audiencia de pares, lo que completa de alguna manera el ciclo de aprendizaje significativo.

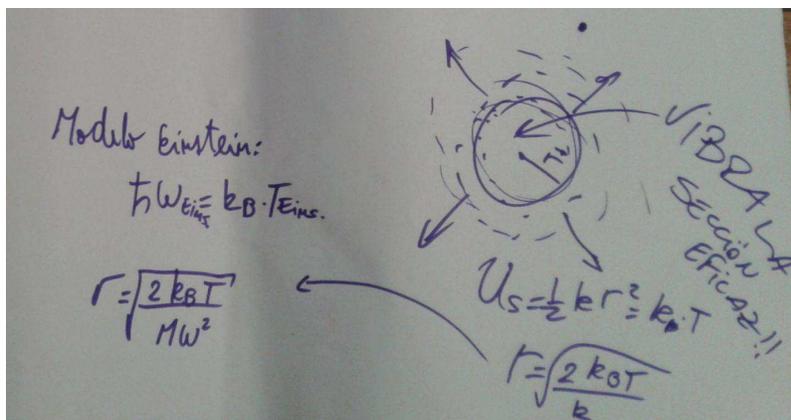


Figura 4.15 Modelo de Einstein y representación de la sección eficaz y su crecimiento en función de la temperatura según el grupo A.

Para esto se les pidió como paso final de esta actividad que describieran el nuevo modelo construido y explicitaran todas las transformaciones que se realizaron sobre el modelo clásico, constituyendo la producción oral y escrita, el entregable y resultado que el aprendizaje activo busca por parte de los educandos.

Durante esta actividad se les pidió ejecutar la función **conductividad Cuantica Metales**( $n$ , masa Atómica  $lon$ ,  $T_{einstein}$ ).

Para el cobre, la masa Atómica del ion es 63,5 g/mol y la temperatura de Einstein es 200 K. Otros metales tienen temperaturas de Einstein en el orden pero con estos parámetros, obtienen resultados similares a los valores empíricos del cobre con un error menor al 1% para el número de Lorenz, sirviendo este “experimento” de validador del modelo.

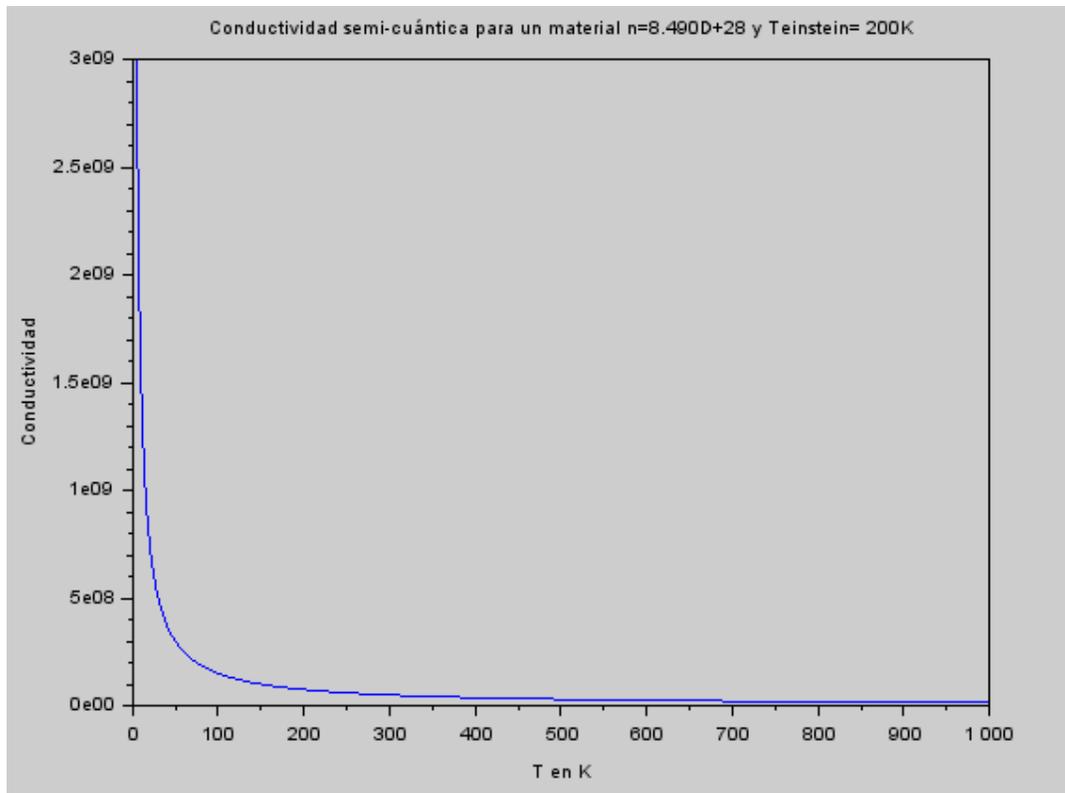


Figura 4.16 Conductividad en función de la temperatura para el cobre, según el modelo semicuántico que mejora Drude, en siemens la primera y en K la segunda. Los valores que arroja son muy buenos en relación al valor empírico.

En las cartulinas se puede ver la puesta en común final de los estudiantes que fueron incorporando todos los conceptos trabajados a un modelo que, aún luego de todos estos agregados, sigue siendo incompleto.

Este modelo es correcto para un metal, o para un conductor, pero deja muchas dudas con respecto a un aislante y a un semiconductor. Aquí todo depende de la densidad de electrones libres, y de la temperatura a la que vibran.

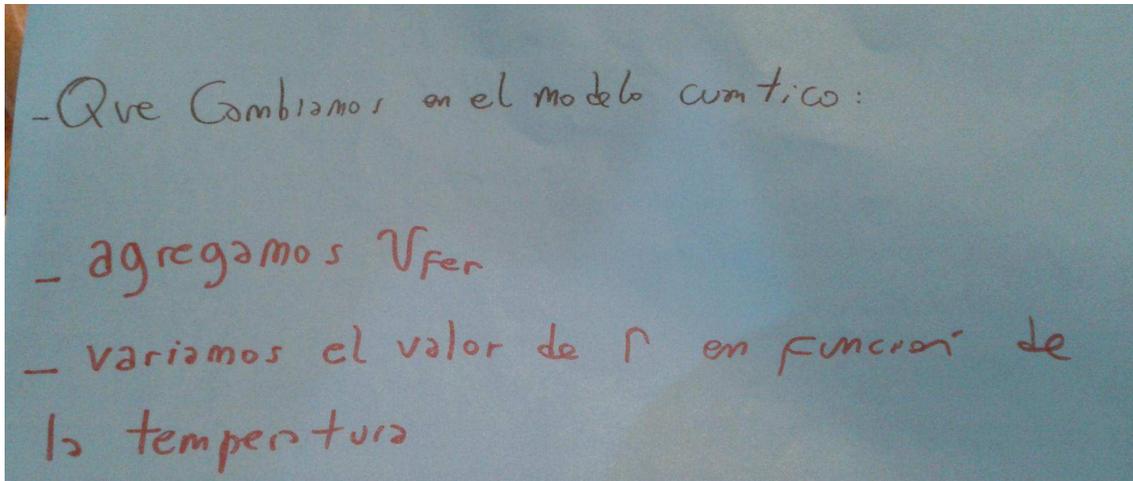


Figura 4.17 Grupo B concluye que las modificaciones al modelo clásico realizadas para obtener resultados aceptables son "Agregamos  $v_{\text{Fermi}}$ . Variamos el valor de  $r$  en función de la temperatura".

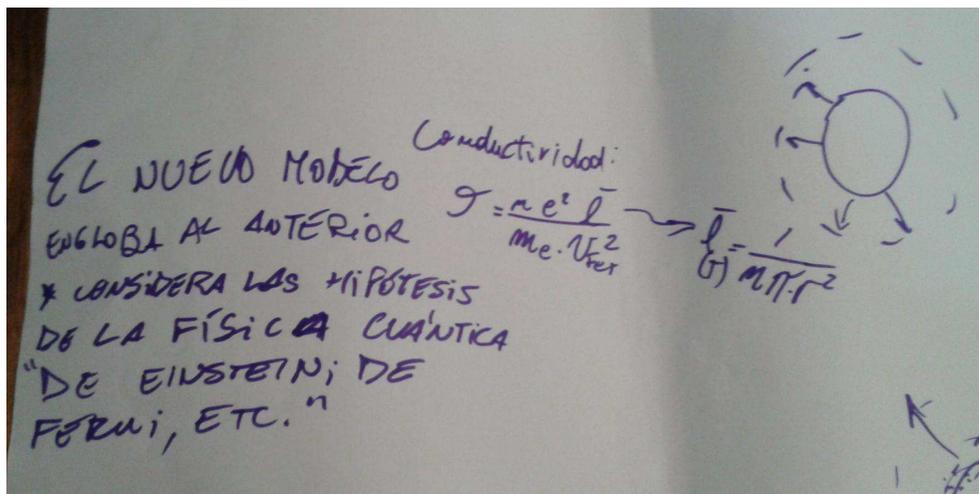


Figura 4.18 Conclusiones del grupo A. La ecuación de conductividad con el camino libre medio redefinido en función de la temperatura y "El nuevo modelo engloba al anterior y considera las hipótesis de la física cuántica, de Einstein, de Fermi, etc."

Al momento de concluir esta actividad, quedaba poco tiempo para continuar con las otras actividades planificadas. Se les preguntó a los alumnos "¿Qué otra cosa habría que tener en cuenta en el material?" y a esta altura estaba llegando al tiempo disponible, siendo la segunda semana de trabajo (Se dedicaron 10 hs cátedra a esta secuencia), por lo que la etapa final consistió en el uso de simulaciones a modo de demostraciones únicamente. En esta última etapa entonces, ya no fue posible utilizar toda la metodología desarrollada en las otras actividades.

## Otros materiales.

Los estudiantes conocen el caso de un pozo finito de potencial, y conocen el caso de una barrera de potencial. Se les solicitó que ejecutaran el script *mecanicaCuantica.sce* utilizando 1, 2, 3, 10, y 20 barreras simbolizando esa cantidad de átomos en el cristal, para ver qué sucedía con los niveles de energía. Se les hizo probar diferencias entre la distancia y el ancho de las barreras con alturas de 50 a 200 para las barreras y anchos de 3 a 10 en unidades arbitrarias.

Se pretendía realizar la serie de preguntas a continuación descritas:

**¿Qué se observa con los niveles?**

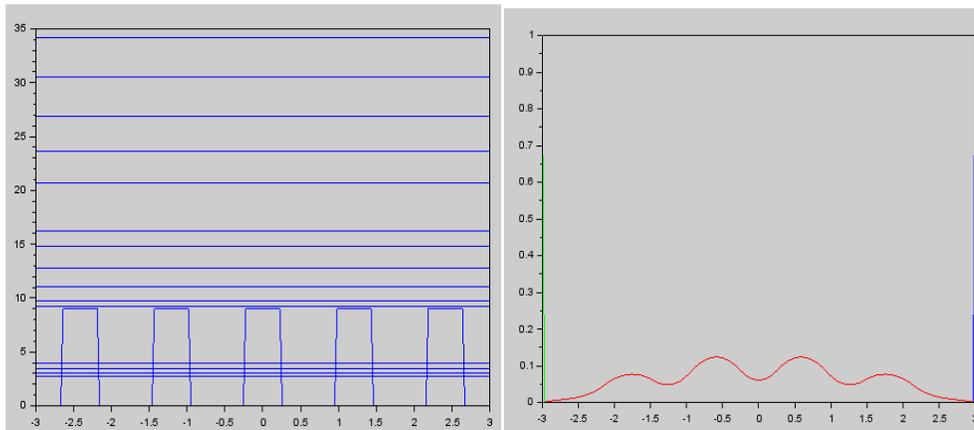
**¿Cómo se relaciona esto con las propiedades de conducción y con el nivel de Fermi?**

**¿Dónde se van a ubicar los electrones?**

**¿Cómo podría un electrón ocupar otro nivel?**

**¿Qué ocasionaría un campo eléctrico?**

**¿Qué sucedería con los niveles si la cantidad de átomos son infinitos(o muchos)?**



**Figura 4.19** A izquierda barreras de potencial y valores posibles de energía. Obsérvese que los valores se agrupan de acuerdo a la cantidad de barreras. Además se observa una banda de valores ligados abajo, y valores de energía para el electrón casi libre, que se asemejan a la distribución para un pozo infinito sin barreras. A la derecha se ve la primera función de onda permitida para un electrón interactuando con ese potencial.

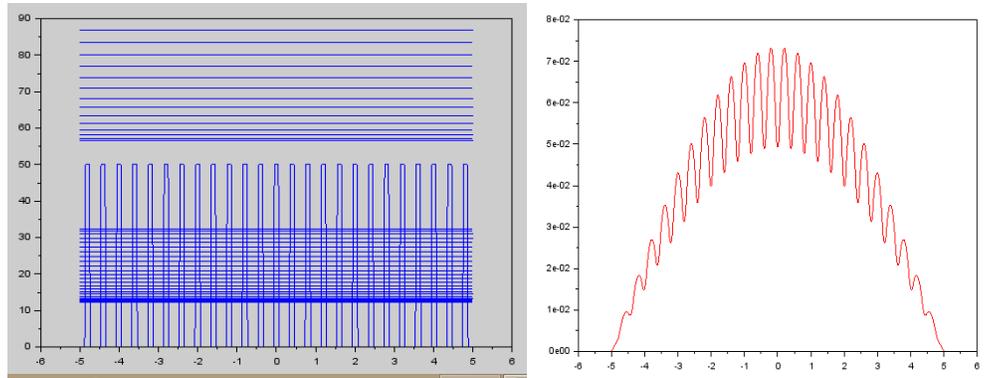


Figura 4.20 Se puede observar lo mismo que en la figura anterior, solo que esta vez la cantidad de barreras es mucho mayor y se puede evaluar mejor la diferencia entre estados ligados y estados de “dispersión”.

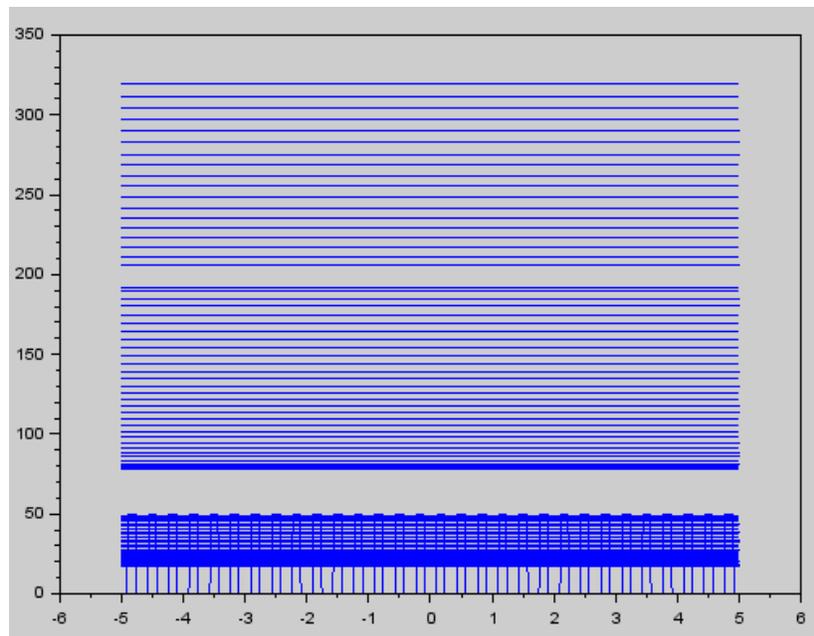


Figura 4.21 Observando suficiente cantidad de niveles, se puede ver como los niveles permitidos se agrupan entre sí, dejando espacios no permitidos entre grupos de niveles. Estos agrupamientos son lo que considerando infinitas barreras o infinitos átomos en el cristal, se consideran bandas continuas permitidas y bandas prohibidas.

No se realizó el trabajo en cartulinas por falta de tiempo, pero se solicitó a los estudiantes que respondiesen a estas preguntas de manera oral y se consiguió que visualicen la existencia de estados que se acercan unos a otros y que su número dependía de la cantidad de átomos del material modelado. Los estudiantes pudieron ver las diferencias entre distintos materiales y que visualicen la existencia de bandas de energía formadas por muchos niveles muy cercanos entre sí.

Es importante el hecho de que estas bandas se relacionan con la posibilidad de existencia de electrones con esas energías. Algunos de los alumnos tenían idea de la existencia de bandas debido a que en el tercer año de la carrera cursan una materia denominada “Electrónica Básica” donde se estudian semiconductores desde un punto de vista práctico, pero las relacionaban con la ocupación de una posición espacial por parte de los electrones (esta información se obtuvo directamente de uno de los alumnos participantes luego de la actividad) y no por una posición dentro del espacio de fases.

Existía, intuitivamente y generada presumiblemente por libros de que no se enfocan en la Física, esta creencia a corregir, aclarando que los diagramas de la derecha indican la función de onda de un electrón en un autoestado determinado (el script permite seleccionar cualquier nivel de energía y graficar la función de onda correspondiente a un electrón en dicho estado). Se hizo mención de que los diagramas muestran que dependiendo de la energía que posee el electrón este tiene más posibilidades de encontrarse en determinada sección del material cuando esta energía corresponde a un estado ligado pero que sin embargo no hay mucha diferencia entre las funciones de onda de electrones con la energía de las bandas de conducción con respecto a la función de onda de un electrón es un estado de dispersión. (Comparación entre la función de onda para estados ligados en Figura 4.23 Niveles energéticos a la izquierda y función de onda a la derecha para un nivel correspondiente a un estado de energía superior al potencial. Esta función de onda no tiene mucha diferencia con respecto a la función de onda de un electrón libre. (ver Figura 4.24) y la función de onda de estados de dispersión en Figura 4.24 Electrón “libre” en un pozo infinito de potencial en un estado de dispersión. Su función de onda no tiene diferencia con una onda viajera, u onda de asociada a un fotón o electrón en estado libre.)

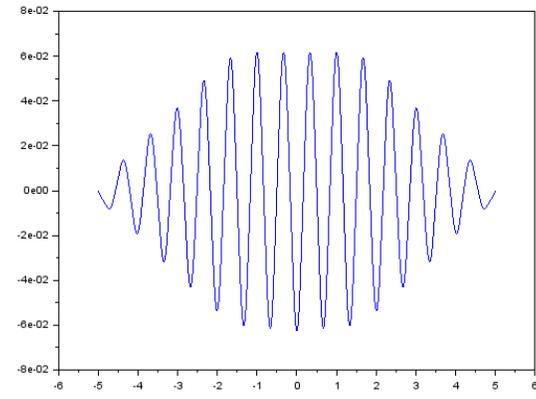


Figura 4.22 Función de onda para un electrón en un estado ligado.

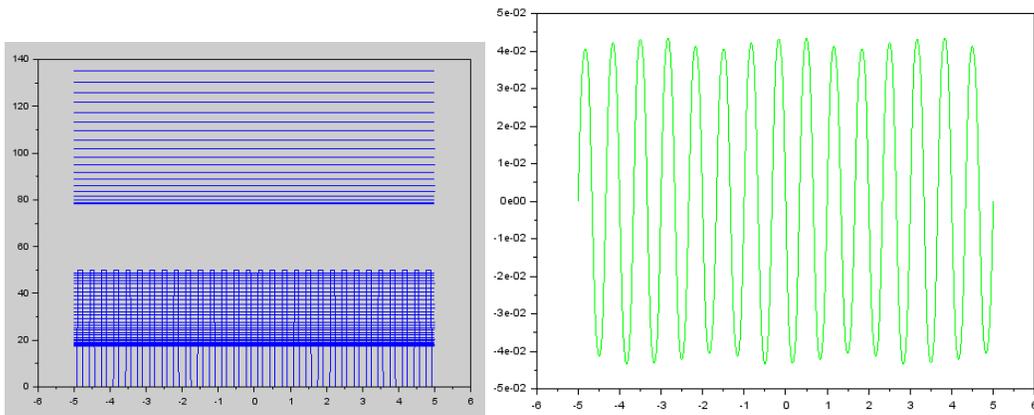


Figura 4.23 Niveles energéticos a la izquierda y función de onda a la derecha para un nivel correspondiente a un estado de energía superior al potencial. Esta función de onda no tiene mucha diferencia con respecto a la función de onda de un electrón libre. (ver Figura 4.24)

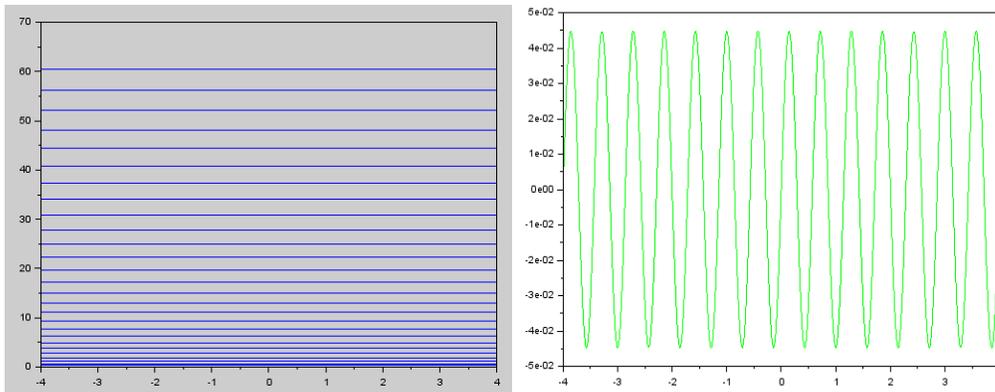


Figura 4.24 Electrón "libre" en un pozo infinito de potencial en un estado de dispersión. Su función de onda no tiene diferencia con una onda viajera, u onda de asociada a un fotón o electrón en estado libre.

De esta manera, es claro que el modelo estudiado anteriormente donde se consideraba a los electrones de un conductor como electrones en un estado únicamente ligado al pozo de potencial infinito y no a los iones de manera independiente, es una excelente aproximación si las energías de los electrones están muy por arriba del nivel donde tienen interacción con los iones (o en este caso barreras).

Finalmente todos estaban convencidos que el electrón podía, mediante diversos medios como un campo externo, fotones, o energía térmica, entre otros, obtener la energía necesaria para saltar entre niveles, y que con la energía necesaria un electrón podría pasar de un nivel en una banda inferior a un nivel en una banda superior. Estos estudiantes no habían estudiado el átomo de Schrödinger aún, pero sí el cuerpo negro de Planck, el átomo de Bohr, y el efecto fotoeléctrico, por lo que estaban familiarizados con el cambio de niveles energéticos de los electrones.

Se concluyó la clase con los alumnos identificando los materiales con bandas muy alejadas una de la otra como materiales aislantes y a los materiales con las bandas más cercanas, cuyos electrones requerirían menos energía para pasar de una a otra, como materiales conductores y semiconductores, además de tener en cuenta la cantidad de electrones que puede haber en cada una de estas bandas, que es el doble de la cantidad disponible de niveles. Esto lo realizaron los estudiantes solos, a partir de los resultados que arrojaban las diferentes simulaciones.

Por último, y a modo de epílogo, se ejecutó la simulación **ejemploBarrerasDopadas.sce** con diferentes datos y se comentó rápidamente en qué consisten los semiconductores intrínsecos, y extrínsecos, a los que se les agregan impurezas para obtener efectos de solapamiento y acercamiento entre bandas. Corriendo un par de ejemplos similares, con diferente alto de la barrera que representa diferentes tipos de dopaje en el material, se obtienen diferentes configuraciones de niveles energéticos, y densidad de niveles para las bandas que se forman.

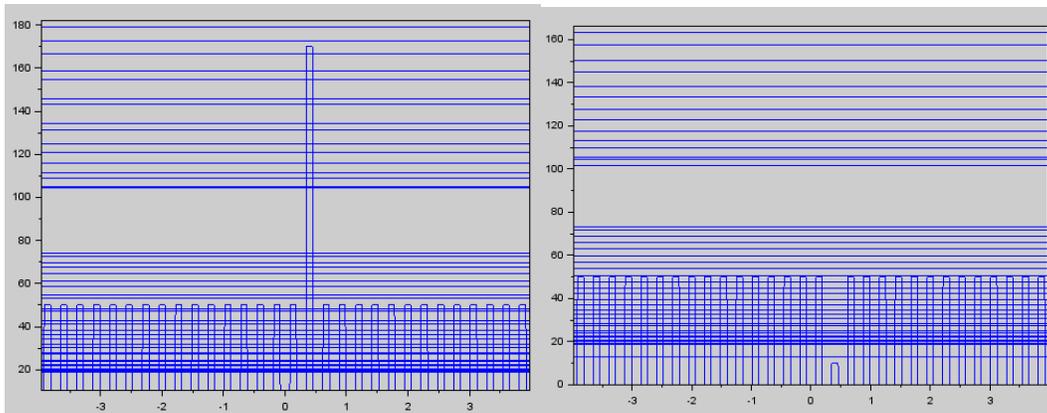


Figura 4.25 De acuerdo al dopaje o modificación en una de las barreras dentro de todo el arreglo se puede ver como pueden modificarse y distanciarse o acercarse los niveles energéticos de los bordes de las bandas, o grupos. La modificación es pequeña, pero es suficiente para crear dispositivos electrónicos cuando se dopan de manera distinta dos regiones de un semiconductor.

Lamentablemente no se pudo realizar este tipo de cálculos y actividades con valores que permitieran análisis más profundos, pero se pudo observar un interés generado en los alumnos por este tipo de herramientas de cálculo numérico.

Sobre los LED se mencionó solamente que así como los diodos tienen diferentes dopajes en sus dos semiconductores, esto genera una diferencia entre la banda de conducción del semiconductor tipo p, y el semiconductor tipo n, y el electrón que pase de un material al otro deberá deshacerse de la energía correspondiente para este salto, la cual puede emitirse en forma de luz. Esta actividad terminó el segundo jueves consecutivo de trabajo, a las 23.00 hs, con un cansancio grande por parte de los estudiantes.

## Resultados

En el momento que se terminó el trabajo, se relevaron las opiniones y comentarios sobre las actividades y a posteriori, varias semanas luego de realizado este trabajo y no a modo de post-test sino de encuesta sobre los aprendizajes auto-percibidos, se realizaron las siguientes preguntas a los alumnos.

*¿Podrías decir que aprendiste algo?*

*Si aprendiste, conocés o recordás algo de lo trabajado en la clase, ¿cómo podrías resumirlo en una oración?*

*La metodología utilizada de preguntas, trabajo en grupo, escritura en cartulina y puestas en común ¿te parece que aportó algo?*

*El trabajar con scripts en scilab sobre estos temas de física contemporánea te parece que:*

- *ayudó a hacer las cosas más simples (¿Cómo?)*
- *complicó más la cuestión (¿Cómo?)*
- *Da igual. No ayudó ni complicó nada.*
- *Otro.*

Lo que revelaron las respuestas es que los estudiantes en general consideraron valiosa la metodología de aprendizaje activo, la cual describen como de construcción colaborativa y participativa, y que en general el uso de scripts les pareció importante pero que consideran que al mismo tiempo que aportaba valor al trabajo facilitando la visualización o interpretación de los fenómenos, también complejizaba otros aspectos en cuanto a sus carencias en la operación de este tipo de programas.

Todos reconocen que algo aprendieron, siendo sus conclusiones similares en esencia aunque diferentes en contenido. Por ejemplo, mientras algunos declaran como principal aprendizaje el haber entendido que la conductividad y su variación con la temperatura no se puede explicar con Física clásica, otro estudiante que había hecho un muy buen pre-test y posee un título terciario en electrónica, resumió que había aprendido que las distancias entre bandas energéticas no se correspondían directamente con una posición física con respecto al núcleo de un determinado átomo, ya que un electrón casi libre estaría casi deslocalizado, lo cual es un aprendizaje de una sutileza mayor a la esperada y muestra que esta secuencia completó de alguna manera los conocimientos previos que el alumno tenía.

De todas maneras, en general, la respuesta sobre lo aprendido fue que “la conductividad no se puede explicar únicamente mediante modelos clásicos” sin dar mayores detalles, lo cual, aunque simple, es una de las verdades subyacentes a toda la secuencia.

## Conclusiones

El presente documento es el resultado de un trabajo con varios objetivos los cuales se satisficieron en diferentes niveles.

Los objetivos específicos, planteados en la introducción, son:

- Investigar y sistematizar los modelos físicos involucrados y las metodologías posibles para representarlos y explorarlos.
- Desarrollar productos software que cumplan con los requerimientos necesarios y representen los modelos trabajados.
- Gestionar las actividades para la utilización de dicho software como apoyo al proceso de enseñanza en un curso de nivel terciario.
- Evaluar el impacto del recurso y las estrategias desarrolladas en el proceso de enseñanza-aprendizaje.

El objetivo de sintetizar las temáticas referentes a teorías de la conducción que fueran abordables desde los conocimientos de estudiantes de nivel superior no universitario, se considera alcanzado satisfactoriamente, aunque la calidad o pertinencia del sesgo realizado aún debe ser evaluado con otros grupos de personas.

Los productos software (scripts, cálculos y programas) que se desarrollaron para la enseñanza de estos temas fueron evaluados como “útiles” y “muy interesantes” por los alumnos con los que se trabajó y las actividades que se desarrollaron para utilizarlos fueron consideradas de valor didáctico por los mismos. Los conceptos expresados por los participantes de manera oral y por escrito en las cartulinas, demuestran que se realizó un proceso y que se alcanzaron los objetivos didácticos planteados para la actividad.

Se gestionaron las actividades correspondientes a la enseñanza de los temas sugeridos utilizando los materiales y estrategias desarrollados para tal fin, y aunque no se alcanzó un éxito total, debido a que no se pudieron desarrollar todas las tareas planificadas en el tiempo disponible y quedando las tareas sobre semiconductores prácticamente fuera de la actividad, igualmente se demostró que la metodología de trabajo es válida, aplicable, y arroja buenos resultados.

Se observó sin embargo que los tiempos necesarios para el despliegue de estas estrategias son considerables, y que no están siempre disponibles, ya que el despliegue de estas actividades consumió cerca de 10 hs cátedra o dos semanas de trabajo.

En cuanto al impacto del recurso y de las estrategias desarrolladas en el proceso de enseñanza-aprendizaje, se requiere otro tipo de evaluación que no pudo desarrollarse, ya que debería sistematizarse a lo largo de una ventana de tiempo mayor, y sobre todo aplicando estas estrategias a un número de alumnos considerable, del que no se dispone en el INSPT. Este es un tema que queda abierto para futuros trabajos, al igual que el diseño de nuevos instrumentos de evaluación cualitativa y cuantitativa para este tipo de actividades, ya que aunque los instrumentos utilizados fueron satisfactorios son básicos acorde a una primera aproximación a este tipo de trabajo.

Las apreciaciones de los estudiantes sobre este trabajo son en general buenas, aunque arrojan datos que hay que considerar para posteriores implementaciones. La metodología de trabajo mediante aprendizaje activo y el uso de simulaciones y programas son evaluadas positivamente por los alumnos y se evidencian los aprendizajes fundamentales esperados de estas secuencias, aunque se requiere continuar trabajando para obtener mediciones más precisas en cuanto a la eficiencia de estas estrategias y el impacto posterior que puedan tener en los estudiantes.

En cuanto al ámbito donde se puso en práctica, el trabajo tuvo un impacto positivo, debido a que gracias a los comentarios y críticas de los estudiantes se dio lugar a la modificación del programa de la asignatura Computación III, que ahora incluye el desarrollo de simulaciones y cálculos mediante el lenguaje Scilab similares a las implementadas en este trabajo, y el análisis de su valor descriptivo y educativo en el marco de diferentes modelos físicos.

## Bibliografía

- Alvarado, C. (2015). Ambientes de aprendizaje en Física: Evolución hacia ambientes constructivistas. *Latin American Journal of Physics Education* , S12021-S12025.
- Ashcroft, N., & Mermin, D. (1976). *Solid State Physics*. Orlando: Harcourt Inc.
- Benegas, J. (2009). Reporte del 2do. Taller Regional del Cono Sur sobre Aprendizaje Activo: Mecánica (AAMe Córdoba 2009) y la 2da. Conferencia Regional del Cono Sur sobre Aprendizaje Activo de la Física (CRAAF-2). *Latin American Journal of Physics Education* , 3 (3), 690-693.
- Bonwell, C., & Eison, J. (1991). *Active Learning: Creating Excitement in the Classroom*. Washington D.C.: ASHE-ERIC Higher Education.
- Cohen-Tannoudji, C., Laloë, F., & Diu, B. (1977). *Quantum Mechanics* (Vol. 1 & 2). New York: John Wiley.
- Conectar Igualdad. (s.f.). *Software que traen las netbooks*. Recuperado el 27 de 07 de 2017, de Conectar Igualdad - Wiki: <https://conectarigualdad.wikispaces.com/Software+que+traen+las+netbooks>
- DuBridge, L. A. (1939). Some Aspects of the Electron Theory of Solids. *American Journal of Physics* 7 , 357-366.
- Eisberg, R., & Resnick, R. (2000). *Física Cuántica. Átomos, moléculas, sólidos, núcleos y partículas*. México: Limusa.
- Etkina, E., & Van Heuvelen, A. (2007). Investigative Science Learning Environment - A Science Process Approach to Learning Physics. En E. F. Cooney, *Research-Based Reform of University Physics*. College Park MD: American Association of Physics Teachers.
- Etkina, E., & Van Heuvelen, A. (2004). Investigative Science Learning Environment. *Forum on Education of the American Physical Society* (Spring Issue), 12-14.
- Etkina, E., Warren, A., & Gentile, M. (2006). The role of models in physics instruction. *The physics teacher* (44), 34-39.
- Fanchiotti, H. (1978). *Semiconductores*. La Plata: Centro Estudiantes de Ingeniería de La Plata.
- Feldman, G., Medsker, L., & Benmouna, N. (2010). A Student-Centered Active Learning Environment for Introductory Physics. En W. K. Micheleni (Ed.), *Teaching and Learning*

*Physics today: Challenges? Benefits? Proceedings of selected papers of the* (pág. 262). Reims: Università degli Studi di Udine.

Frish, S., & Timoreva, A. (1968). *Curso de Física General* (Vol. 2). Moscú: MIR.

FSU ODL. (2011). Chapter 8 - Using Active Learning in the Classroom. En *Instruction at FSU: A Guide to Teaching & Learning Practices* (págs. 75-102).

Gangoso, Z. (2014). *Clase 4: Fenómenos, modelos y la percepción. Propuesta Educativa con TIC: Enseñar con TIC Física 1. Especialización docente de nivel superior en Educación y TIC*. Buenos Aires: Ministerio de Educación de la Nación.

Gangoso, Z. (2014). *Clase 5: Modelado, conocimientos previos y simulaciones. Propuesta Educativa con TIC: Enseñar con TIC Física 1, Especialización docente de nivel superior en educación y TIC*. Buenos Aires: Ministerio de Educación de la Nación.

Gangoso, Z., Truyol, M. E., Brincones, I., & Gattoni, A. (2008). Resolución de problemas, comprensión, modelización y desempeño: un caso con estudiantes de ingeniería. *Lat. Am. J. Phys. Educ*, 2 (3), 233-240.

García, R., Zozulya, A., & Stickney, J. (01 de February de 2008). MATLAB codes for teaching quantum physics: Part 1. *arXiv:0704.1622 [physics.ed-ph]*. Worcester,, Massachusetts, USA. Recuperado el 27 de 7 de 2017

Georgia State University. (s.f.). *Hyper Physics Laplacianos*. Recuperado el 27 de 07 de 2017, de Hyper Physics: <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbasees/lapl.html>

Georgia State University. (s.f.). *Hyper Physics Número de Lorentz*. Recuperado el 27 de 07 de 2017, de Hyper Physics: <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/thermo/thercond.html>

Georgia State University. (s.f.). *Hyper Physics Tablas de resistividad*. Recuperado el 27 de 07 de 2017, de Hyper Physics: <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/Tables/rstiv.html>

Giancoli, D. (2009). *Física para ciencias e ingeniería, con física moderna* (4ta edición ed., Vol. 2). México: Prentice Hall.

Greca I.M., M. M. (2002). Mental, physical, and mathematical models in the teaching and learning of physics. *Science Education* (86), 106-121.

Halliday, D., Resnick, R., & Krane, K. (1999). *Física Vol. 2*. México: Compañía Editorial Continental.

- Hermann, C. (2005). *Statistical Physics Including Applications to Condensed Matter*. New York: Springer Science+Business Media, Inc.
- Hestenes, D. (1987). Toward a modeling theory of physics instruction. *American Journal of Physics* (55), 440-454.
- Hook, J., & Hall, H. (1991). *Solid State Physics*. Chichester: John Wiley & Sons Ltd.
- Koehler, M., & Mishra, P. (2009). What is technological pedagogical content knowledge (TPACK)? *Contemporary issues in technology and teacher education* , 9 (1), 60-70.
- Lakatos, I. (1983). *La metodología de los programas de investigación científica*. Madrid: Alianza Universidad.
- Martinez-Avedaño, R. (Enero de 2014). EIGENVALORES DE UNA MATRIZ LAPLACIANA. *Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, Instituto de Ciencias Básicas e Ingeniería. Boletín Científico PADI* , 1 (2).
- Marušić, M., & Sliško, J. (2014). Students' Experiences in Learning Physics: Active Learning Methods and Traditional Teaching. *Latin American Journal of Physics Education* , 8 (4).
- Mishra, P., & Koehler, M. J. (2006). Technological pedagogical content knowledge: A framework for teacher knowledge. *Teachers college record* , 108 (6), 1017.
- Patricio Cordero, S. (25 de 11 de 2013). Métodos Numéricos. <http://www.cec.uchile.cl/cinetica/pcordero/todos/MetNum2013.pdf> . Chile: Universidad de Chile, Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas. Recuperado el 27 de 07 de 2017
- Planinsic, G. (2010). Stimulating scientific reasoning through explorations of simple experiments. *Teaching and Learning Physics today: Challenges? Benefits? Proceedings of selected papers of the* (pág. 34). Reims, France: Università degli Studi di Udine.
- Serway, R. A., & Jewett, J. W. (2009). *Física para Ciencias e Ingeniería con Física Moderna* (Vol. 2). Mexico D.F.: Cengage Learning.
- Serway, R. A., Moses, C. J., & Moyer, C. A. (2006). *Física Moderna (tercera edición)*. México: Thomson.
- Slater, J. (1951). The Electron Theory of Solids. *American Journal of Physics* 19 , 368-374.
- Tipler. (1981). *Física Moderna*. bla: Reverté.

Truyol, M. E., Gangoso, Z., & Sanjosé Lopez, V. (2012). Modeling in Physics: A matter of experience? *Lat. Am. J. Phys. Educ.* , Vol. 6 (Suppl 1), 260-265.

Udaf, A., Reedera, R., Velmrea, E., & Harrisonh, P. (2006). Comparison of methods for solving the Schrodinger equation for multiquantum. *Proceedings of the Estonian Academy of Sciences, Engineering*. 12, pág. 246. Estonian Academy Publishers.

Utreras Díaz, C. (2 de Febrero de 2008). Numerical Solution of the 1D Schrödinger Equation: Bloch Wavefunctions. *arXiv:physics/0503171 [physics.ed-ph]* . Valdivia, Chile.  
Recuperado el 27 de 07 de 2017

Young, H. D., & Freedman, R. A. (2009). *Sears Zemansky Física Universitaria con Física Moderna Volumen 2* (12 ed.). Mexico: Pearson Educación.

Zill, D. G. (2009). *Ecuaciones diferenciales con Aplicaciones de Modelado*. México D.F.: Cengage Learning Editores S.A.

## Anexo 1 – Actividades entregadas a los estudiantes

Este primer anexo contiene las actividades que se le entregaron a cada uno de los estudiantes para llevar a cabo en clase, tal cual las versiones impresas para ellos, con todos los errores, cosas de más y de menos que hubo en octubre de 2015. Algunas de las actividades no fueron realizadas de la misma manera, como se puede observar en el capítulo 4, y otras no fueron realizadas en lo más mínimo.

### **Modelos de Conducción:**

#### **¿Qué pasa en el interior de un material cualquiera? ¿Qué es un conductor?**

- En grupos discuta y realice esquemas y una descripción de al menos 2 modelos conceptuales microscópicos que pueda pensar sobre cómo se conduce la electricidad a través de un conductor.

- Piensen/diseñen un experimento que permita probar estos modelos desarrollados.

- Planteen las predicciones para su modelo en este experimento del estilo.

SI LA REALIDAD ES COMO DICE MI MODELO, AL REALIZAR XXXXX EL RESULTADO SERÁ YYYYY, SI NO ES ESTE EL RESULTADO, ENTONCES EL MODELO PLANTEADO PROBABLEMENTE NO SEA CORRECTO.

De contarse con el tiempo necesario deberían testearse los experimentos.

De no existir este tiempo, simplemente se pueden utilizar simulaciones.

Una vez discutido esto, se recomienda ejecutar el script *puntoMoviendose.sce*

#### **¿Cómo se mueven los electrones? ¿Qué causa este movimiento? ¿Qué variables están relacionadas con este movimiento?**

Desarrollar Hipótesis.

Plantear posibles experimentos para falsear dichas hipótesis.

Realizar predicciones.

**Ejecutar Experimentos.** Aquí hay que modificar la metodología para buscar resultados de los experimentos, datos, tablas, que correspondan a los resultados de los experimentos planteados.

A partir de los resultados, habría que ejecutar el script **electronBrownianoConceptual.sce** utilizando diferentes valores para la temperatura y para el campo eléctrico.

¿Qué se observa?

Explicaciones posibles a lo que se observa.

¿Qué factores serán de importancia para explicar lo que se observa?

Se propone como método para el planteo de hipótesis-experimentos-predicciones el analizar de acuerdo a la física conocida, qué debería pasar.

Por ejemplo, yo puedo proponer o suponer que el campo eléctrico es importante para el desplazamiento del electrón. De esta manera, además de testear en el experimento virtual, puedo testear las ideas mediante la discusión y experimentos mentales. ¿Qué le sucedería a un electrón en el vacío al aumentar el campo eléctrico? ¿Qué cosas cambiarían en el conductor?

Luego de visto este modelo, desarrollados los conceptos de camino libre medio, tiempo de relajación, y encontrada una expresión clásica para la conductividad de un metal, ejecutaremos el script **ConduccionClasica.sce**. Una vez llamado este script, ejecutaremos la función **conductividadClasica** pasando como parámetros los valores de densidad numérica del cobre y de otros metales.(estos valores pueden calcularse a partir de la densidad la masa molar y el conocer cuántos electrones libres tiene cada elemento. De todas maneras, algunos valores de  $n$  vienen cargados en el script de manera que se puedan probar, en  $1/m^3$   $n_{Cobre}=8,47 \cdot 10^{28}$ ,  $n_{Aluminio}=18,1 \cdot 10^{28}$ ,  $n_{Oro}=5,90 \cdot 10^{28}$ .

De esta manera examinaremos el orden de los resultados

Metal	Conductivity ( $\times 10^6$ Siemens/m)	Resistivity ( $\times 10^{-8}$ Ohms/m)
Silver	62.1	1.6
Copper	58.5	1.7
Gold	44.2	2.3
Aluminium	36.9	2.7

Otro parámetro que se utilizará para medir la validez del modelo, es el número de Lorentz, el cual se puede calcular en base a valores experimentales, y que se puede calcular en este modelo.

Para esto, la simulación también calcula la conductividad térmica, la cual está relacionada con el movimiento de los electrones pero sobre la cual no se especula en esta clase. Se toman los valores como vienen.

**¿Cómo explicar la discrepancia de este modelo?**

**¿Qué hipótesis les parece que son más erróneas en las deducciones realizadas?**

**¿Qué correcciones realizaría a esos parámetros?**

Luego de consultarnos cuáles podrían ser los aspectos más errados del modelo, y teniendo en cuenta que es un modelo clásico, procedemos a estudiar la estadística de Fermi-Dirac.

Suponer que los electrones son un gas ideal, requiere asumir ciertas hipótesis como que los electrones no interactúan entre sí, que son partículas puntuales, y que se mueven con velocidades que solo dependen de la temperatura del gas y de la masa de las partículas, respetando la estadística de Maxwell Boltzmann.

Pero los electrones son partículas cuánticas. Hay que modelarlos de otra manera. Podemos empezar suponiendo que los electrones no interactúan entre sí, y están libres en el metal. que es lo que estuvimos haciendo hasta el momento, pero que están atrapados en un pozo de potencial del cual NO PUEDEN ESCAPAR.

Una manera de verlo es ejecutando la función **pozoInfinito()**;

El resultado de los niveles de energía para el pozo infinito es:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2 \cdot m \cdot a^2} n^2$$

Son además de partículas, ondas, y tienen propiedades como el spin. La estadística que se aplica a las partículas cuánticas es estadística cuántica, como la estadística de Bose-Einstein, o la Estadística de Fermi-Dirac.

Los electrones tienen spin  $\frac{1}{2}$ ., esto quiere decir que un electrón en particular puede tener un spin  $m_s = \frac{1}{2}$  o un  $m_s = -\frac{1}{2}$  Las partículas con spin semientero son fermiones y los fermiones cumplen con el Principio de Exclusión de Pauli, que establece que dos fermiones no pueden tener los mismos números cuánticos al mismo tiempo. La estadística que se aplica entonces es la estadística de Fermi-Dirac.

Esta estadística establece entonces el número de partículas que puedo llegar a encontrar con determinada energía. Imaginando que el único número cuántico existente fuera  $n$ , que establece el nivel de energía en el que se encuentra el átomo, sólo podría tener una partícula por nivel, cosa muy distinta a lo que encuentro en las partículas clásicas donde puede haber varias partículas que se muevan exactamente a la misma velocidad con la misma energía.

Podemos ver una gráfica de la función de distribución de Fermi-Dirac ejecutando el programa **fermiDirac.sce** .y llamando a la función **ploteaFD()**. Esta función solicita el ingreso de la energía de Fermi en eV. ¿Qué es la energía de Fermi?

Es la energía límite. Los niveles de energía existentes son infinitos, mientras que los electrones no. Hay una cantidad finita, aunque muy grande de electrones. Se supone que si todos los electrones se encuentran en su estado de energía mínimo, irán llenando los niveles hasta un nivel máximo de energía. A partir de ese nivel, todos los niveles se encuentran vacíos.

Por supuesto que a medida que los electrones ganan energía por otra razón(energía térmica por ejemplo) algunos electrones pueden estar por arriba del nivel de Fermi.

Esa esa la razón por la que aparecen unas colas en la distribución de Fermi a distintas temperaturas distintas de cero. Los electrones más cercanos a la energía de Fermi pueden escapar de ese nivel.

Existe también una función para calcular la energía de Fermi en un pozo infinito (modelando el metal como un pozo infinito). Ejecutando **energiaDeFermi1D(nCobre)** o **energiaDeFermi3D(nCobre)** y pasando la densidad numérica de electrones libres del material obtenemos el nivel de energía de Fermi para el material en cuestión(en este caso Cobre).

Podemos calcular la temperatura a la que equivaldrían estas energías, y también la velocidad a la que se movería un electrón ya que la energía térmica de una partícula está en el orden de **kT**. De esta manera podríamos saber a qué velocidad media se estarían moviendo los electrones que andan en el orden de la energía de fermi ( Se puede ejecutar la función **velocidadDeFermi( ...)** ) pasando la energía de Fermi en eV.

Si en nuestro modelo anterior consideramos que los electrones no se mueven a la velocidad media que obteníamos por el modelo clásico, sino que su velocidad media es la velocidad de Fermi, obtendremos un nuevo modelo. El problema aquí es que la velocidad de fermi no depende de la temperatura, por lo que la conductividad no dependerá de la temperatura.

Tomarse el tiempo para pensar qué otros factores pueden llegar a cambiar.

Realizar pruebas sobre el modelo.

Si llega el tema del oscilador de Einstein, se puede analizar el oscilador cuántico con el script ***mecanicaCuantica.sce***.

Una vez realizado esto, ejecutar la simulación ***conductividadCuanticaMetales(n,masaAtomicalon, Teinstein)***. Para el cobre, la masa Atómica del ion es 63,5 g/mol y la Temperatura de Einstein es 200K. Otros metales tienen temperaturas de Einstein en el orden.

Este modelo es correcto para un metal, o para un conductor, pero deja muchas dudas con respecto a un aislante y a un semiconductor. Aquí todo depende de la densidad de electrones libres, y de la temperatura a la que vibran.

¿Qué otra cosa habría que tener en cuenta en el material?

Podemos volver a trabajar sobre el modelo inicial del movimiento Browniano si es necesario.

Una vez estudiado el caso, ejecutar ***mecanicaCuantica.sce*** utilizando 1, 2, 3, 10, y 20 barreras simbolizando esa cantidad de átomos.

Probar diferencias entre la distancia y el ancho. Se propone usar alturas de 50 a 200 para las barreras y anchos de 3 a 10.

**¿Qué se observa con los niveles?**

**¿Cómo se relaciona esto con las propiedades de conducción y con el nivel de Fermi?**

**¿Donde se van a ubicar los electrones?**

**¿Cómo podría un electrón ocupar otro nivel?**

**¿Qué ocasionaría un campo eléctrico?**

**¿Qué sucedería con los niveles si la cantidad de átomos son infinitos(o muchos)?**

Abra y cambie los datos de ***bandasenergiamejoradas.sce*** y ejecútelo. Interprete los gráficos.

¿Qué sucede con los valores de  $k$ ? ¿por qué hay valores no permitidos?

Interpételo desde la suposición de que los electrones son ondas.

Para terminar, hay que pensar en semi-conductores.

¿Qué son los semiconductores tipo p y tipo n?

Ejecute la simulación **ejemploBarrerasDopadas.sce** con diferentes datos, e interprete qué produce en los niveles de energía la sustitución de un átomo.

Con esto mismo trabaje sobre el archivo de falstad <http://www.falstad.com/qm1d/> y observe las mismas cosas <http://www.falstad.com/qm1dcrystal/>

por último utilizaremos el archivo de semiconductores de phet.

Explique en palabras qué observa en estas simulaciones y qué relación tienen con el cambio de un ión observada en la simulación de dopaje en scilab.

## Anexo 2. Código de programación.

En este anexo se incluyen los códigos de Scilab que cargados cada uno en un .sce con el nombre correcto pueden ser ejecutados sin problemas. Además, el código aquí mostrado se encuentra disponible para ser descargado en <https://sites.google.com/site/fisicomputacion/teorias-de-la-conduccion>

No se encuentra disponible en este anexo todo el código que se utilizó en las secuencias didácticas, debido a que parte del mismo es muy técnico y no aporta nada al entendimiento del fenómeno físico. Sin embargo, todo el código está disponible para ser descargado.

### Movimiento Browniano

Se incluye el código completo de ElectronBrownianoConceptual.sce, pero no los códigos específicos sobre como realizar una animación en scilab, que se encuentran disponibles para descargar en el sitio referido anteriormente.

```
ElectricField=input("Ingrese campo Eléctrico (V/m): ");
qE=1.6;

TK=input("Ingrese Temperatura en K: ");
dx=.05*ElectricField/TK;
exec("ANIMAR.sci");
exec("aleatorios.sci");
// Create data
t=0:0.05:30;// Time data
x=t;
y=t;
x(1)=0;
y(1)=0;
i=2;
Px=aleatorios(length(t),1);//llena el vector con números aleatorios
que representan
Py=aleatorios(length(t),1);// el avance de la partícula en ambos ejes,
instante a instante
while i<=length(x)
x(i)=x(i-1)+(Px(i)-0.5)*TK/30+dx;// Position data
y(i)=y(i-1)+(Py(i)-0.5)*TK/30;
i=i+1;
end
animacion(x,y);
AvanceTotal=[x(length(x))-x(1) y(length(x))-y(1)]
printf("El desplazamiento total de la partícula fue %f de los cuales
en el eje x solo se avanzó %f\nEl recorrido libre medio fue
%f", (AvanceTotal(1)^2+AvanceTotal(2)^2)^0.5, AvanceTotal(1), mean((Px.^2
+Py.^2).^0.5));
```

## Modelo de Drude

El código corresponde al script `ConduccionClasica.sce` que además inicializa gran cantidad de las variables que se utilizarán posteriormente en la secuencia didáctica. Este script además incluye varias funciones que calculan parámetros como la conductividad térmica, o la sección eficaz, y las funciones `conductividadClasica(n)` y `conductividadCuanticaMetales(n, masaAtomicaIon, Teinstein)` que calculan la conductividad en función de la temperatura según el modelo de Drude clásico, y su adaptación cuántica.

```
nCobre=8.49e28; //densidad numérica del cobre/m3
nOro=5.90e28; //densidad numérica del cobre/m3
nAluminio=18.1e28; //densidad numérica del cobre/m3
kboltz=1.38066e-23; //cte de boltzmann en J/K
Efield=3 //Campo eléctrico V/m;
e=1.6e-19;
me=9.11e-31;
exec('fermiDirac.sci');
hbarra=1.05457e-34; //en J.s
function K=conductividadTermicaClasica(vmedia, n, l)
K=0.5*vmedia*n*l*kboltz;
endfunction
function K=conductividadTermicaCuantica(vmedia, Tabs, l)
K=n*(%pi^2)*(kboltz^2)*l.*Tabs'/(3*me*vmedia)
endfunction
function V=vmediaClasica(masa, T)
V=sqrt(8*T*kboltz/(%pi*masa));
endfunction
function V=VelocidadDeFermi3D(n)
V=velocidadDeFermi(energiaDeFermi3D(n));
endfunction
function [r2]=longitudOscilacionION2(masaAtomicaIon, n, T, Teinstein)
c=3e8; //m/s
mNucleon=1.67e-27; //masa aproimada nucleon
r2=2*T*(hbarra^2)/(mNucleon*masaAtomicaIon*kboltz*Teinstein^2);
endfunction

function conductividad=conductividadCuanticaMetales(n, masaAtomicaIon,
Teinstein)
Tabs=5:1:1000; //temperatura absoluta. Kelvin

vmedia=VelocidadDeFermi3D(n); //segun Fermi-Dirac
r2=longitudOscilacionION2(masaAtomicaIon, n, Tabs, Teinstein); //longitud
oscilacion
seccionEficaz=%pi*r2;
l=(n*seccionEficaz)^(-1); //recorrido libre medio clasico
tao=l/vmedia; //tiempo de relajación.
conductividad=n*e*e*tao/me;
j=conductividad*Efield; //j densidad de corriente
KconductividadTermica=conductividadTermicaCuantica(vmedia, Tabs, l);

LorentzNmbr=KconductividadTermica./(conductividad.*Tabs');
4*kboltz^2/(%pi*e^2)
figure(0);
xlabel('T en K');
```

```

title('Conductividad semi-cuántica para un material n='+string(n)+" y
Teinstein= "+string(Teinstein)+"K");
ylabel('Conductividad');

plot(Tabs,conductividad);
figure(1);
xlabel('T en K');
title('número de Lorentz en la teoría semi-cuántica para
n='+string(n));
ylabel('L=K/(conductividad*T)');
plot(Tabs,LorentzNmbr);
printf("El número de Lorentzsemicuantico a 5°C es
"+string(LorentzNmbr(273)));
endfunction

functionconductividad=conductividadClasica(n)
Tabs=5:1:1000;//temperatura absoluta. Kelvin
vmedia=vmediaClasica(me,Tabs);//segunMaxwellBoltzmann
r=1e-10;//radio atómico
seccionEficaz=%pi*r^2;
l=1/(n*seccionEficaz);//recorrido libre medio clasico
tao=l./vmedia;//tiempo de relajación.
conductividad=n*e*e*tao/me;
j=conductividad*Efield;//j densidad de corriente
KconductividadTermica=0.5*vmedia*n*1*kboltz;
LorentzNmbr=KconductividadTermica./(conductividad.*Tabs);
4*kboltz^2/(%pi*e^2)
figure(0);
xlabel('T en K');;
title('Conductividad Clásica para un material n='+string(n));
ylabel('Conductividad');
plot(Tabs,conductividad);
figure(1);
xlabel('T en K');
title('número de Lorentz Clásico para n='+string(n));
ylabel('L=K/(conductividad*T)');
printf("El número de Lorentz clásico a 5°C es
"+string(LorentzNmbr(273)));
plot(Tabs,LorentzNmbr);
endfunction

```

## Modelo Mecánico Cuántico. Fermi-Dirac

Este modelo incluye varios scripts. Una parte de ellos se realizó para trabajar con la mecánica estadística para fermiones o partículas con spin semientero, y es lo que se incluye a continuación. El código dentro del archivo FermiDirac.sci. Un conjunto de funciones que permiten calcular y graficar la distribución estadística de Fermi-Dirac

```

kboltz=1.38066e-23;//J/K
hplaxnck=6.625e-34;//J.s

hbarra=1.05457e-34;//J.s
Qelectron=1.6e-19;
me=9.11e-31;//kg
function[ef]=energiaDeFermi3D(n)//n es la densidad numérica 1/m3

energiaJoules=((n)^(2/3.0))*((3/%pi)^(2/3))*hplaxnck^2/(8*me);//un
cm de largo, el primer nivel solo

```

```

ef=energiaJoules/1.6e-19;

endfunction
function[ef]=energiaDeFermiD(n) //n es la densidad numérica 1/m3
NSobreL=(n)^(1/3);
efJoules=((NSobreL)^2)*hplaxnck^2/(32*me); //un cm de largo, el primer
nivel solo
ef=efJoules/1.6e-19;
endfunction
function[velocidadMporS]=velocidadDeFermi(energiaEnEV)
velocidadMporS=(2*energiaEnEV*(1.6e-19)/me)^0.5;
endfunction
//clc;
///figure('color','white');
functionploteaFD()
Ef=input('Ingrese el Nivel de Fermi en eV: ');
ch=1;
E=0:0.01:Ef+3;

sized=length(E);
k=1.38e-23;
e=1.6e-19;
fE=zeros(E);
fori=1:sized
ifE(i)<Efthen
fE(i)=1;
else
fE(i)=0;
end
end;
plot(E,fE,"b");
fori=1:sized
fE(i)=1/(exp((E(i)-Ef)*e/(k*300))+1);
end;
plot(E,fE,"g");
xlabel('Energy in eV');
title('Función de distribución de Fermi-Dirac - Azul=0K, Verde =
300K');
ylabel('f(E)');
while(ch<>0)
T=input('Ingresetemperaturaen kelvin: ');
fori=1:sized
fE(i)=1/(exp((E(i)-Ef)*e/(k*T))+1);
end;
plot(E,fE,"r");

xlabel('Energy in eV');
title('Función de distribución de Fermi-Dirac - Azul=0K, Verde =
300K');
ylabel('f(E)');
ch=input('Press 1 to continue and 0 to exit: ');
end;
endfunction
function[FD]=FermiDirac(E, EFermi)

T=0:20;
FDAux=(exp((E-kboltz*TFermi)/kboltz*T)+1).^(-1);
plot(T,FDAux,"*");
FD=FDAux;
endfunction

```

```
function TF=TemperaturaFermi (EFermi)
TF=EFermi*1.6e-19/kboltz;
endfunction
```

## Modelo Mecánico Cuántico. Resolución de la Ecuación de Schrödinger

El principal script de la secuencia es quizás el que permite analizar la estructura de un sólido modelado como un conjunto de barreras, y esto se encuentra en el archivo `mecanicaCuantica.sce`. Este script a su vez, se vale de funciones auxiliares que le permiten realizar gráficas energéticas y crear diferentes distribuciones de potencial. Las mismas se encuentran en el archivo `funcionesSchrodinger.sci`, que se reproduce a continuación de este código.

```
exec('funcionesSchrodinger.sci');

N=input("Ingrese cantidad de puntos que tendrá el cálculo: ");
L=input("Ingrese el rango de x. L. X irá de -L a L: ");

x=linspace(-L,L,N);
dx=x(2)-x(1);
Laplaciano=(-2*diag(ones(N,1),0)+diag(ones((N-1),1),1)+diag(ones(N-1,1),-1))/dx^2;
Laplaciano(1,1)=0;Laplaciano(1,2)=0;Laplaciano(2,1)=0;//la f(-L) = 0
Laplaciano(N,N-1)=0;Laplaciano(N-1,N)=0;Laplaciano(N,N)=0;//la f(L) = 0
hbar=1;m=1;
U=x-x;
nroBarreras=input("Ingrese la cantidad de barreras de potencial. Puede ingresar 0: ");
if nroBarreras==0 then
konstante=input("Ingrese la constante del oscilador armonico o 0: ")

U=1/2*konstante*x.^2;// oscilador armónico
else
altoBarrera=input("Ingrese el Alto de las barreras en eV: ");
proporcion=input("Ingrese la proporción entre el ancho de la barrera y el espacio vacío 0<p<1: ");
U=barreras(L,nroBarreras,altoBarrera,x,proporcion);
end

H=-(1/2)*(hbar^2/m)*Laplaciano+diag(U,0);
[PSI,E]=spec(H);

printf("dibujar las primeras 3 eigenfunciones\n");

figure(1);
plot(x,PSI(:,3),"r");
plot(x,PSI(:,2),"b");
plot(x,PSI(:,1),"g");

NumeroDeAutoEstados=input("Ingrese numero de autoestados que desea visualizar: ");
autoEstados=diag(E);
diagramaEnergetico(x,U,autoEstados,NumeroDeAutoEstados);
nAutoVector=input("Ingrese Nro de Autofunción y autovalor adicional que desea visualizar. -1 para terminar: ");
```

```

while nAutoVector > 0,
    scf(1);
    plot(x, PSI(:, nAutoVector), "r");
    printf("El autovalor nro %i es\n", nAutoVector, autoEstados(nAutoVector));
    nAutoVector = input("Ingrese Nro de Autofunción y autovalor adicional que desea visualizar. -1 para terminar: ");
end;
printf("Gracias por participar");

```

A continuación, algunas de las funciones correspondientes código auxiliar correspondiente a funcionesSchrodinger.sci. En el archivo original, disponible en el link especificado a principios del anexo pueden encontrarse también las funciones que crean U(x) para potenciales correspondientes a materiales con impurezas.

```

function redibujarDiagrama(n)
    diagramaEnergetico(x, U, autoEstados, n);
endfunction
function diagramaEnergetico(x, U, E, n)
    figure(2);
    scf(2);
    plot(x, U);
    auxx(1) = min(x);
    auxx(2) = max(x);
    for i = 1:n
        auxy(1) = E(i);
        auxy(2) = E(i);
    end;
    plot(auxx, auxy);
end;

endfunction

function [res] = heaviside(x)
    for i = 1:length(x)
        if x(i) > 0 then
            res(i) = 1;
        else
            res(i) = 0;
        end;
    end;
endfunction

function [Up] = barreras(L, nroBarreras, altura, x, proporcionAncho)
    V = zeros(x);
    V = V';
    w = 2 * L / nroBarreras; //porcion de dominio para cada barrera y espacio vacio
    a = proporcionAncho * w; //ancho de cada barrera
    for i = 0:(nroBarreras-1)
        V = V + altura * heaviside(x + nroBarreras * w / 2 - i * w - (w - a) / 2) -
            altura * heaviside(x + nroBarreras * w / 2 - i * w - (w - a) / 2 - a);
    end;
    Up = V;
endfunction;

```