

ESTRUCTURA ELECTRÓNICA DE LOS MATERIALES

CLAVE: 2087

ÁREA: FÍSICA DE MATERIALES

CARÁCTER: OPTATIVO

CRÉDITOS: 8

MODALIDAD: CURSO

HRS. TEÓRICAS: 4

HRS. PRÁCTICAS:

SERIACIÓN INDICATIVA ANTECEDENTE: Introducción a la Física de Materiales

Objetivos: Este curso tiene como objetivo introducir al alumno a una visión de los fenómenos electrónicos en los materiales empleando un enfoque moderno desde el punto de vista de la interacción entre orbitales atómicos. Se estudia las propiedades electrónicas basados en el enlace químico local y el orden atómico presente en los sólidos, por lo que lo hace un curso apropiado para aquellos estudiantes interesados en la ciencia de los materiales.

TEMARIO:

1.- INTRODUCCIÓN

- Algunos conceptos matemáticos asociados a la Mecánica Cuántica
- El átomo de hidrógeno
- Metales, semiconductores y aislantes

2.- LA MOLÉCULA DIATÓMICA

- La molécula diatómica homonuclear: la molécula de hidrógeno
- La molécula diatómica heteronuclear
- Electronegatividad
- Energía de enlace y orden de enlace

3.- CADENAS ATÓMICAS FINITAS E INFINITAS

- Cadenas atómicas y el espacio k
- Orden de enlace en un sistema infinito
- Densidad de estados local y total
- Bandas de energía y energía de enlace
- El teorema de los momentos

4.- SISTEMAS BIDIMENSIONALES Y TRIDIMENSIONALES

- El sólido visto como una molécula gigante
- La red cuadrada y la red cúbica
- Las zonas de Brillouin para las redes fcc y bcc

- Ecuación de movimiento para un electrón bajo la presencia de un campo externo y el concepto de masa efectiva
- El concepto de hueco
- La superficie de Fermi
- Densidad de estados electrónicos
- La matriz de densidad, orden de enlace y energía de enlace
- El teorema de los momentos para cristales bidimensionales y tridimensionales

5.- BRECHAS DE ENERGÍA

- La cadena infinita con dos estados por átomo
- Distorsiones de Peierls
- Metales, aislantes y el enlace metálico

6.- ENLACE S-P: EL CASO DEL SILICIO

- Enlace s-p entre dos átomos de silicio
- Dependencia angular de las integrales de saltos entre los enlaces s-p y p-p
- Orbitales híbridos s-p
- Modelos simples de la estructura electrónica en el enlace tetraédrica
- Estructura de bandas del silicio empleando una base atómica mínima

7.- TEORÍA DEL ELECTRÓN LIBRE

- Aproximación del electrón libre
- Electrones dentro de una caja y densidad de estados
- Bandas de energía calculadas a partir de la combinación lineal de orbitales atómicos
- Modelo del electrón casi libre
- Pseudo potenciales
- Apantallamiento
- Correlación e intercambio

8.- PROPIEDADES DE LOS METALES DENTRO DE LA APROXIMACIÓN DEL ELECTRÓN LIBRE

- Estadística de Fermi-Dirac
- Calor específico electrónico
- Conductividad eléctrica
- Conductividad térmica
- Ley de Wiedemann-Franz
- Efecto Hall
- Energía de cohesión en metales simples

Bibliografía básica:

Sutton a. P., Electronic Structure of Materials, Oxford Science Pub., 1st Edition, 1994.
(Recomendado como texto).

Bibliografía complementaria:

Harrison W. A., Electronic Structure and the Properties of Solids, Dover Publications, 1989.

Kittel C., Introduction to Solid State, John Wiley & Sons, 7th edition, 1990 (?).

Ibach H. and Luth H., Solid State Physics, Springer Verlag, 3th edition, 1993.

Gersten J. I. And Smith F. W., The Physics and Chemistry of Materials, John Wiley & Sons, 1st edition, 2001.

Sugerencias didácticas

Exposición del temario por el profesor frente al pizarrón

Sugerencias de evaluación

Mediante tareas, trabajos de investigación y exámenes

Perfil profesiográfico

Físico especialista en física de materiales