ESTRUCTURA ELECTRÓNICA DE MATERIALES

12 CRÉDITOS

OBJETIVO

Este curso tiene como objetivo introducir al alumno a la visión moderna de la estructura electrónica de los materiales. A diferencia de los cursos tradicionales del estado sólido, donde se hace énfasis en la teoría del electrón libre o la teoría de bandas en un material cristalino perfecto invocando el concepto del espacio recíproco, en el presente curso se hace énfasis en el espacio real como un enfoque complementario en el que se pueden tratar tanto los defectos electrónicos como las propiedades de materiales amorfos, además de los cristalinos. De esta manera se proporciona una metodología versátil y más útil para entender la estructura electrónica de los materiales. Siendo este enfoque más cercano a la concepción química de la descripción de sistemas electrónicos (moleculares y extendidos), favorecerá la correlación rápida entre los conocimientos de los alumnos egresados de las carreras de física, química e ingeniería y el contenido del curso. Para este curso se requiere que el alumno tenga los conocimientos al nivel de los cursos de Fundamentos de Matemáticas para Materiales y de Introducción a la Mecánica Cuántica. Este curso tiene una orientación teórica y requiere que el alumno dedique de 10 a12 horas de trabajo individual.

TEMARIO

1. Introducción (8 hrs)
   - Revisión de algunos conceptos matemáticos asociados a la Mecánica Cuántica: bras y kets
   - El átomo de hidrógeno
   - Metales, semiconductores y aislantes

2. La molécula diatómica (8 hrs)
   - La molécula diatómica homonuclear: la molécula de hidrógeno
   - La molécula diatómica heteronuclear
   - Electronegatividad
   - Energía de enlace y orden de enlace

3. Sistemas finitos e infinitos (12 hrs)
   - Cadenas moleculares 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
   - La aleación binaria

4. Sistemas bidimensionales y tridimensionales (12 hrs)
   - El sólido visto como una molécula gigante
   - La red cuadrada
   - La red cúbica
   - Las zonas de Brillouin para las redes fcc y bcc
   - La ecuación de movimiento para un electrón bajo la presencia de un campo externo

- El concepto de hueco
- La superficie de Fermi
- La densidad de estados en cristales bidimensionales y tridimensionales
- La matriz de densidad, orden de enlace y la energía de enlace
- El teorema de los momentos aplicado a los cristales bidimensionales y tridimensionales

5. Brechas de energía (8 hrs)
   - La cadena infinita con dos estados s por átomo
   - Brechas de energía en una cadena lineal de una aleación binaria
   - Distorsiones de Peierls
   - Metales, aislantes y el enlace metálico

6. Enlace s-p: el caso del silicio (6 hrs)
   - Enlace s-p entre dos átomos de silicio
   - Dependencia angular de las integrales de saltos asociados a los enlaces s-p y p-p
   - Híbridos sp
   - Modelos simples de la estructura electrónica del silicio con coordinación tetraédrica
   - Estructura de bandas del silicio empleando una base atómica mínima
   - Orden de enlace y energía de enlace en el silicio empleando una base atómica mínima

7. Teoría del electrón libre (10 hrs)
   - Aproximación del electrón libre
   - Electrones dentro de una caja
   - Densidad de estados
   - Bandas de energía en las aproximaciones del electrón libre y calculadas a partir de la combinación lineal de orbitales atómicos
   - Modelo del electrón casi libre
   - Pseudopotenciales
   - Apantallamiento
   - Correlación e intercambio

8. Propiedades de los metales dentro de la aproximación del electrón libre (12 hrs)
   - Estadística de Fermi-Dirac
   - Potencial de contacto
   - Calor específico electrónico
   - Conductividad eléctrica
   - Conductividad térmica
   - La ley de Wiedeman-Franz
   - Efecto Hall
   - Energía de cohesión en metales simples
   - Diferencias energéticas estructurales

9. Metales de transición (12 hrs)
   - El modelo de Friedel
   - Potenciales de Finnis-Sinclair

- Enlaces d-d
- Estructura cristalina en la familia de los metales de transición
- Enlace en las aleaciones metálicas

10. Introducción a la teoría cuantitativa moderna (4 hrs)
    - La aproximación de Born-Oppenheimer
    - Bosquejo de la teoría de la funcional de densidad
    - Algunas aplicaciones

11. Más allá de la teoría de bandas: Tratamiento informativo de temas actuales (4 hrs)
    (NOTA: Este capítulo no debe incluirse en el examen final de la asignatura ni en el examen disciplinario.)
    - Electrones en materiales no cristalinos
    - La brecha energética en el silicio amorfo
    - Localización electrónica
    - Polarones
    - Localización de Anderson
    - Transición metal-aislante
    - Superconductividad
    - Magnetismo
    - Cuasicristales

BIBLIOGRAFÍA

Libro de texto:

Sutton A.P., Electronic Structure of Materials, 1st. Edition, Oxford Science Pub., 1994

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

Kittel C., Introduction to Solid State Physics, John Wiley & Sons, 6th. edition, 1986.
Mckelvey J.P., Física del Estado Sólido y de Semiconductores, Editorial Limusa, 1980.
Ashcroft N.W. and Mermin N.D., Solid State Physics, Holt-Saunders International Editions, 1975.
Ibach H. and Lüth H., Solid State Physics, 3th. edition, Springer Verlag, 1993.
Ziman J. M., Principles of the Theory of Solids, Cambridge University Press, 2nd. Edition, 1972.
Harrison W.A., Electronic Structure and the Properties of Solids, Dover Publications, 1989.