

## Propiedades electrónicas de sólidos

---

Número de créditos: 10

Horas a la semana: 10

Teoría: 6

Práctica: 4

Autoestudio: 6

Requisitos: Ninguno

Clave: AFE-20

Asignatura: Optativa

Materia asociada a la Línea de investigación: MCyER

---

Descripción del Curso: En este curso se estudian las propiedades electrónicas de materiales metálicos, semiconductores y aislantes. Se parte desde el estudio del átomo de hidrógeno y moléculas diatómicas dando lugar a conceptos aplicables a materiales en dos y tres dimensiones.

Índice temático:

1. Introducción: El átomo de hidrógeno. Metales, semiconductores y aislantes.
2. La molécula diatómica: La molécula diatómica homonuclear: la molécula de hidrógeno. La molécula diatómica heteronuclear.
3. Electronegatividad. Energía de enlace y orden de enlace.
4. Sistemas finitos e infinitos: 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.
5. Sistemas bidimensionales y tridimensionales: 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.

6. Brechas de energía: 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.
7. Enlace s-p: el caso del silicio: 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.
8. Teoría del electrón libre: 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.
9. Propiedades de los metales dentro de la aproximación del electrón libre: 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.
10. Metales de transición: 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.

#### Bibliografía:

- Electronic Structure of Materials 1st. Edition. Sutton A.P. Oxford Science Pub. (1994).
- Introduction to Solid State Physics 6th edition. Kittel C. John Wiley & Sons (1986).
- Física del Estado Sólido y de Semiconductores. Mckelvey J.P. Editorial Limusa (1980).
- Solid State Physics. Ashcroft N.W. and Mermin N.D. Holt-Saunders International Editions (1975).

- Principles of the Theory of Solids. Ziman J. M. Cambridge University Press, 2nd. Edition (1972).
- Electronic Structure and the Properties of Solids. Harrison W.A. Dover Publications (1989).