

Propiedades electrónicas de materiales

Requisitos de la materia: Métodos matemáticos II y Mecánica cuántica II.

Descripción de la asignatura: En la Física, el estudio y caracterización de materiales es una parte fundamental. Para materiales sólidos, este estudio lo constituye principalmente el determinar las propiedades electrónicas, ópticas y magnéticas.

Las propiedades electrónicas, estructura de bandas y densidad de estados electrónicos, son una cualidad microscópica de los materiales que permite determinar propiedades macroscópicas como la conductividad óptica, la función dieléctrica ó la fotorefectancia. Estas propiedades se determinan resolviendo la ecuación de Schrödinger para un sistema en particular, para un conjunto de parámetros macroscópicos.

En esta asignatura analizamos los diferentes métodos que existen para resolver la ecuación de Schrödinger y analizamos las propiedades electrónicas de algunos sistemas característicos, como son los aislantes, semiconductores y conductores. También analizamos como cambian estas propiedades al hacer variar los parámetros macroscópicos que definen el sistema Físico.

Índice Temático:

I. Introducción y bases

1. Bases de la mecánica Cuántica. Mecánica cuántica. La estructura electrónica de átomos. Sistemas de una partícula. El átomo de Hidrogeno. La aproximación Born-Oppenheimer. Moléculas diatómicas. El origen del enlace químico. Sistemas de muchos electrones. El principio de exclusión. Sistemas de fermiones no interactuantes. Estructura electrónica de moléculas pequeñas. Orbitales moleculares.
2. Aproximaciones de Hartree y Hartree-Fock. Método autoconsistente. Funciones base tipo Gaussian y Slater. Estructura de un código Hartree-Fock. Evaluación de integrales.

II. Determinación de la estructura electrónica

3. Métodos semiempíricos. Teoría de Tight-Binding. Tight -Binding ortogonal y no ortogonal. Formalismo de Slater-Koster. la molécula más simple. Sistemas cristalinos más complejos.

-
- 
4. Métodos de Primeros principios. Aproximación muffin-tin y el formalismo de ondas planas aumentadas Pseudopotenciales. Teoría del funcional de densidad. Aproximación de densidad local. Aproximación del gradiente generalizado. Formalismo de ondas planas.
 5. Estructura electrónica de sólidos. Bandas de energía. Dinámica del electrón. Tipos de sólidos característicos. Elementos matriciales. Calculo del espectro. Densidad de estados: local y total.

III. Estudios de las propiedades de los sólidos a partir de la estructura electrónica.

6. Enlaces en semiconductores tetrahedricos. Hibridos y sus enlaces. La energía cohesiva. Dependencia de la energía al volumen. Estabilidad estructural y momentos.
7. Propiedades elásticas de semiconductores. Constantes elásticas y modulo de volumen. Frecuencias vibracionales. Modelos de interacción interatómica.
8. Bandas de energía de semiconductores. Números de onda y zonas de Brillouin. Bandas bonding y antibonding.
9. Propiedades electrónicas de semiconductores. Bandas de valencia. Absorción óptica. Masa efectiva. Dinámica de las bandas. Forma de las bandas para huecos.
10. Metales simples, propiedades electrónicas. Estructuras cristalinas. Estados de electrones libres. Factores de estructura y factores de forma. Difracción y superficies de Fermi.
11. Metales simples, propiedades de enlace. Estructura de bandas de energía. Interacciones interatómicas. Propiedades de interacciones interatómicas.

Bibliografía:

1. Walter A. Harrison, "Elementary electronic structure", World Scientific 1999.
2. Walter A. Harrison, "Electronic Structure and the properties of solids", W. H. Freeman and Company 1980.
3. R. M. Martin, "Electronic Structure: Basic theory and practical methods, Cambridge University Press, 2008.

-
- 4. Thijssen, J. M. "Computational Physics", Cambridge, UK: Cambridge University Press, 2001.
 - 5. Kaxiras, E. "Atomic and Electronic Structure of Solids", Cambridge, UK: Cambridge University Press, 2003

Planeación Educativa

Competencias a desarrollar:

Generales:

1. Capacidad de abstracción, análisis y síntesis
2. Capacidad para organizar y planificar el tiempo
3. Conocimientos sobre el área de estudio y la profesión
4. Capacidad de aprender y actualizarse permanentemente
5. Capacidad crítica y autocrítica
6. Capacidad para identificar, plantear y resolver problemas
7. Habilidad para trabajar en contextos internacionales
8. Habilidad para trabajar en forma autónoma
9. Compromiso con la calidad

Específicas:

1. Plantear, analizar y resolver problemas físicos, tanto teóricos como experimentales, mediante la utilización de métodos numéricos, analíticos o experimentales.
2. Utilizar o elaborar programas o sistemas de computación para el procesamiento de información, cálculo numérico, simulación de procesos físicos o control de experimentos.
3. Demostrar una comprensión profunda de los conceptos fundamentales y principios de la física clásica y la moderna.
4. Describir y explicar fenómenos naturales y procesos tecnológicos en términos de conceptos, teorías y principios físicos.
5. Sintetizar soluciones particulares, extrapolándolas hacia principios, leyes o teorías más generales.
6. Demostrar hábitos de trabajo necesarios para el desarrollo de la profesión tales como el trabajo en equipo, el rigor científico, el autoaprendizaje y la persistencia.
7. Buscar, interpretar y utilizar literatura científica.
8. Comunicar conceptos y resultados científicos en lenguaje oral y escrito ante sus pares, y en situaciones de enseñanza y de divulgación.
9. Conocer el desarrollo conceptual de la física en términos históricos y epistemológicos.

Resultados del aprendizaje	Actividades educacionales	TETEh	Evaluación
Conceptos básicos de mecánica cuántica	Teóricas, Practicas (4.5T+4.5P= 9 hrs.) Autoestudio	9 7	Examen escrito
Aproximaciones de Hartree y Hartree-Fock	Teóricas, Practicas (4.5T+4.5P= 9 hrs.) Autoestudio	9 7	Examen escrito
Método semi-empíricos	Teóricas, Practicas (4.5T+4.5P= 9 hrs.) Autoestudio	9 7	Examen escrito
Método de primeros principios	Teóricas, Practicas (4.5T+4.5P= 9 hrs.) Autoestudio	9 7	Examen escrito
Estructura electrónica de sólidos.			
Enlaces en semiconductores	Teóricas, Practicas (4.5T+4.5P= 9 hrs.) Autoestudio	9 7	Examen escrito
Propiedades elásticas de semiconductores	Teóricas, Practicas (4.5T+4.5P= 9 hrs.) Autoestudio	9 7	Examen escrito
Bandas de energía de semiconductores	Teóricas, Practicas (4.5T+4.5P= 9 hrs.) Autoestudio	9 7	Examen escrito
Propiedades electrónicas de semiconductores	Teóricas, Practicas (4.5T+4.5P= 9 hrs.) Autoestudio	9 7	Examen escrito
Propiedades electrónicas de Metales	Teóricas, Practicas (4.5T+4.5P= 9 hrs.) Autoestudio	9 7	Examen escrito
Propiedades de enlace de Metales	Teóricas, Practicas (4.5T+4.5P= 9 hrs.) Autoestudio	9 7	Examen escrito

Total de horas de trabajo del estudiante: (45+45) horas presenciales + (70) horas de autoestudio= 160 hrs.

Número de Créditos: 9