

Calculo de propiedades electrónicas

Número de créditos: 10

Horas a la semana: 10

Teoría: 6

Practica: 4

Requisitos: AFB-1, AFB-2, AFB-3, AFE-1

Clave: **AFE-4**

Asignatura: Especifica

Descripción de la asignatura: La posibilidad de generar corrientes eléctricas en los materiales depende de la estructura e interacción de los átomos que los componen. Los átomos están constituidos por partículas cargadas positivamente (los protones), negativamente (los electrones) y neutras (los neutrones). La conducción eléctrica de los materiales sólidos, cuando existe, se debe a los electrones más exteriores, ya que tanto los electrones interiores como los protones de los núcleos atómicos no pueden desplazarse con facilidad. Los materiales conductores por excelencia son metales, como el cobre, que usualmente tienen un único electrón en la última capa electrónica. Estos electrones pueden pasar con facilidad a átomos contiguos, constituyendo los electrones libres responsables del flujo de corriente eléctrica. En otros materiales sólidos los electrones se liberan con dificultad constituyendo semiconductores, cuando la liberación puede ser producida por excitación térmica, o aisladores, cuando no se logra esta liberación. Los mecanismos microscópicos de conducción eléctrica son diferentes en los materiales superconductores y en los líquidos. En los primeros, a muy bajas temperaturas y como consecuencia de fenómenos cuánticos, los electrones no interactúan con los átomos desplazándose con total libertad (resistividad nula). En los segundos, como en los electrolitos de las baterías eléctricas, la conducción de corriente es producida por el desplazamiento de átomos o moléculas completas ionizadas de modo positivo o negativo. Los materiales superconductores se usan en imanes superconductores para la generación de elevadísimos campos magnéticos.

Contenidos:

- Estados electrónicos.
- Estructura Electrónica de sólidos.
- Estados de volumen y superficie.
- Propiedades electrónicas de metales, semiconductores y aislantes.
- Métodos empíricos.
- Métodos de primeros principios.

Índice Temático:

1. Estados electrónicos. Mecánica cuántica. Estructura electrónica de los átomos. Estructura electrónica de moléculas pequeñas. Enlace polar simple. Moléculas diatómicas.
2. Estructura Electrónica de sólidos. Bandas de energía. Dinámica del electrón. Características de diferentes tipos de sólidos.
3. Estados de volumen y superficie.
4. Propiedades electrónicas de metales, semiconductores y aislantes.
5. Métodos empíricos. Teorema de Bloch. Modelo Tight binding. Método SGHM.
6. Métodos de primeros principios. Método LMTO. Método APW. Método LAPW-lo

Bibliografía Básica:

- Electronic structure and the properties of solids, Walter Harrison, W. H. Freeman and Company, San Francisco, USA (1989).
- Elementary Electronic Structure, Walter Harrison, World Scientific, London (1999).
- Introduction to the electronic Properties of Material, 2nd Edition, David. C. Jiles, Nelson Thornes Ltd, UK (2001).
- Theory of single and multiple interfaces: The method of surfaces Green Function Matching, Federico Garcia Moliner and Victor R. Velasco, World Scientific Publishing Co. London (1992).
- ABCofDFT, Kieron Burke and friends, <http://dft.rutgers.edu/kieron/beta>.