

Estructura de la Materia 2

Clase 8 - Teoría

Docentes

Gustavo Grinblat, Andrea Barral, Adán Garros

Departamento de Física, FCEN, UBA – Primer Cuatrimestre, 2025

Web: <https://asignaturas.df.uba.ar/edlm2-grinblat/>

Electrones en un potencial periódico débil; Repaso

¿Para qué elementos funciona bien la aproximación de electrones cuasi-libres?

Metales de transición Metales nobles

2	Li LITIO	Be BERILIO											B BORO	C CARBONO	N NITRÓGENO	O OXÍGENO	F FLUOR	Ne NEÓN
3	Na SODIO	Mg MAGNESIO											Al ALUMINIO	Si SILICIO	P FÓSFORO	S AZUFRE	Cl CLORO	Ar ARGÓN
4	K POTASIO	Ca CALCIO	Sc ESCANDIO	Ti TITANIO	V VANADIO	Cr CROMO	Mn MANGANESO	Fe HIERRO	Co COBALTO	Ni NIQUEL	Cu COBRE	Zn ZINC	Ga GALIO	Ge GERMANIO	As ARSENICO	Se SELENIO	Br BROMO	Kr KRIPTÓN
5	Rb RUBIDIO	Sr ESTRONCIO	Y ITRIO	Zr CIRCONIO	Nb NIOBIO	Mo MOLIBDENO	Tc TECNICIO	Ru RUTENIO	Rh RODIO	Pd PALADIO	Ag PLATA	Cd CADMIO	In INDIO	Sn ESTAÑO	Sb ANTIMONIO	Te TELURIO	I YODO	Xe XENÓN
6	Cs CESIO	Ba BARIO	La-Lu Lantánidos	Hf HAFNIO	Ta TANTALO	W WOLFRAMIO	Re RENIÓ	Os OSMIO	Ir IRIDIO	Pt PLATINO	Au ORO	Hg MERCURIO	Tl TALIO	Pb PLOMO	Bi BISMUTO	Po POLONIO	At ASTATO	Rn RADÓN

Electrones en un potencial periódico y teorema de Bloch: Cristal finito

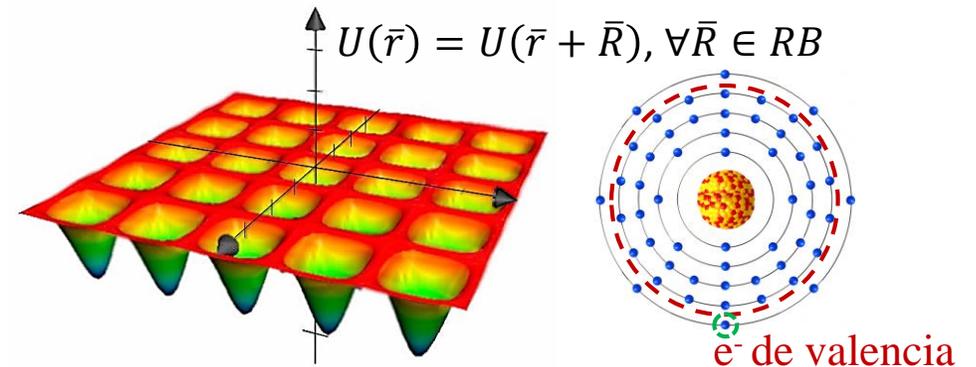
Los autoestados de $\mathcal{H} = K + U$ pueden elegirse como:

Índice de banda

$$\psi_{n\bar{k}}(\vec{r}) = e^{i\bar{k}\cdot\vec{r}} u_{n\bar{k}}(\vec{r}) \quad \text{con} \quad u_{n\bar{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = u_{n\bar{k}}(\vec{r})$$

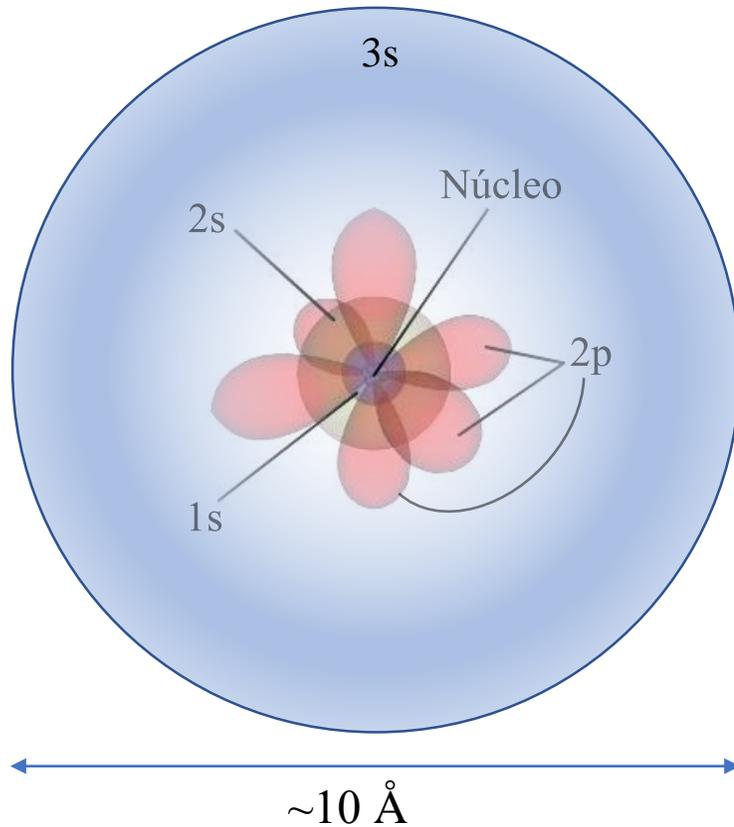
∈ 1ZB y cumple con CCP de BvK

$$\psi_{n\bar{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = e^{i\bar{k}\cdot\vec{R}} \psi_{n\bar{k}}(\vec{r}); \text{ Volumen por } \bar{k} \text{ permitido: } \frac{(2\pi)^3}{V}$$

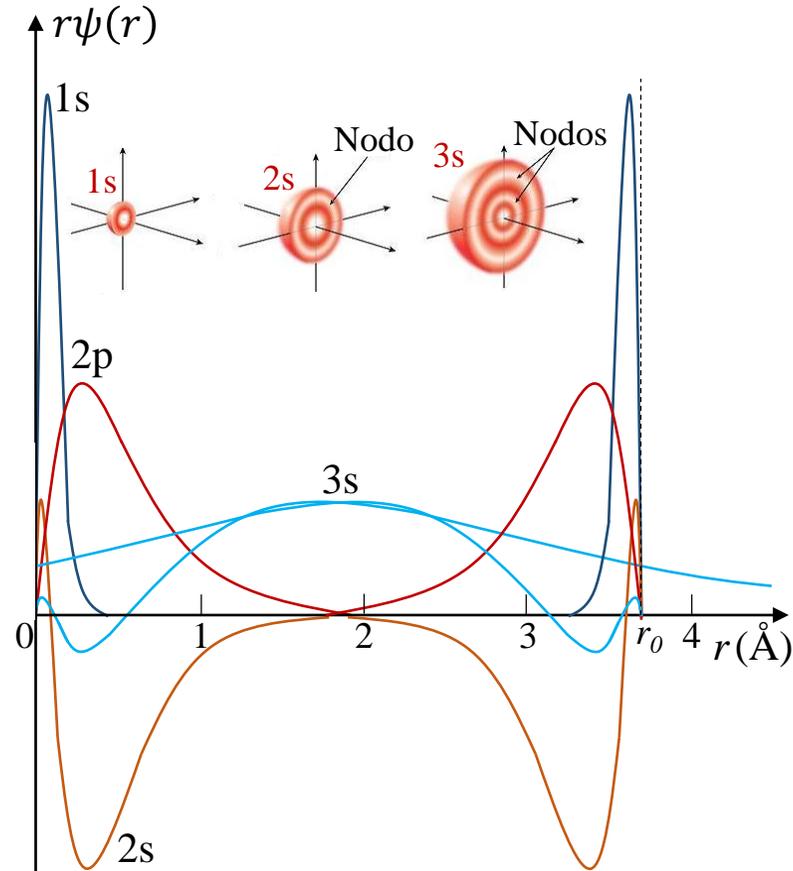


Formación de bandas a partir de orbitales atómicos

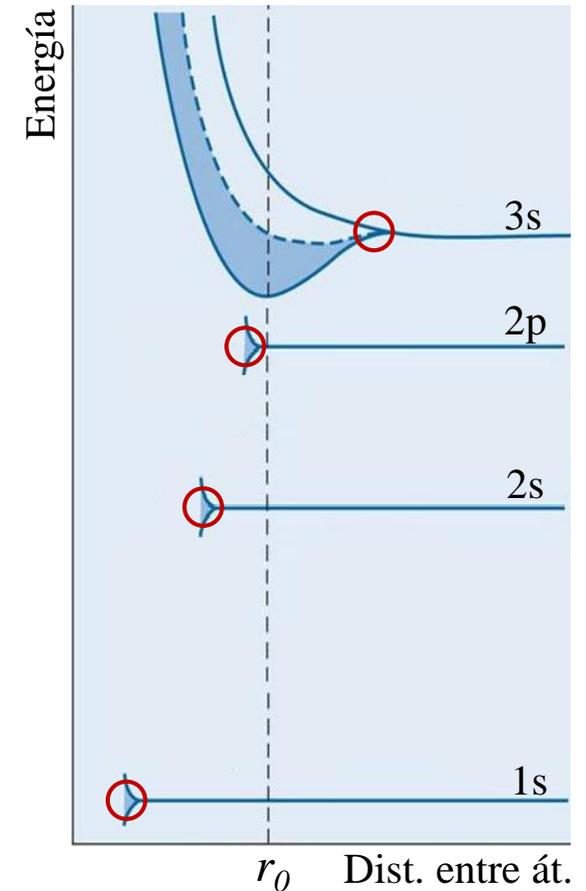
¿Qué sucede cuando acercamos átomos aislados para formar un cristal?: Ejemplo del Na



Configuración e⁻ del Na: $[1s^2 2s^2 2p^6] 3s^1$
Ne



Hay una amplia superposición entre orbitales 3s, y esencialmente nula entre orbitales 1s, 2s, y 2p.



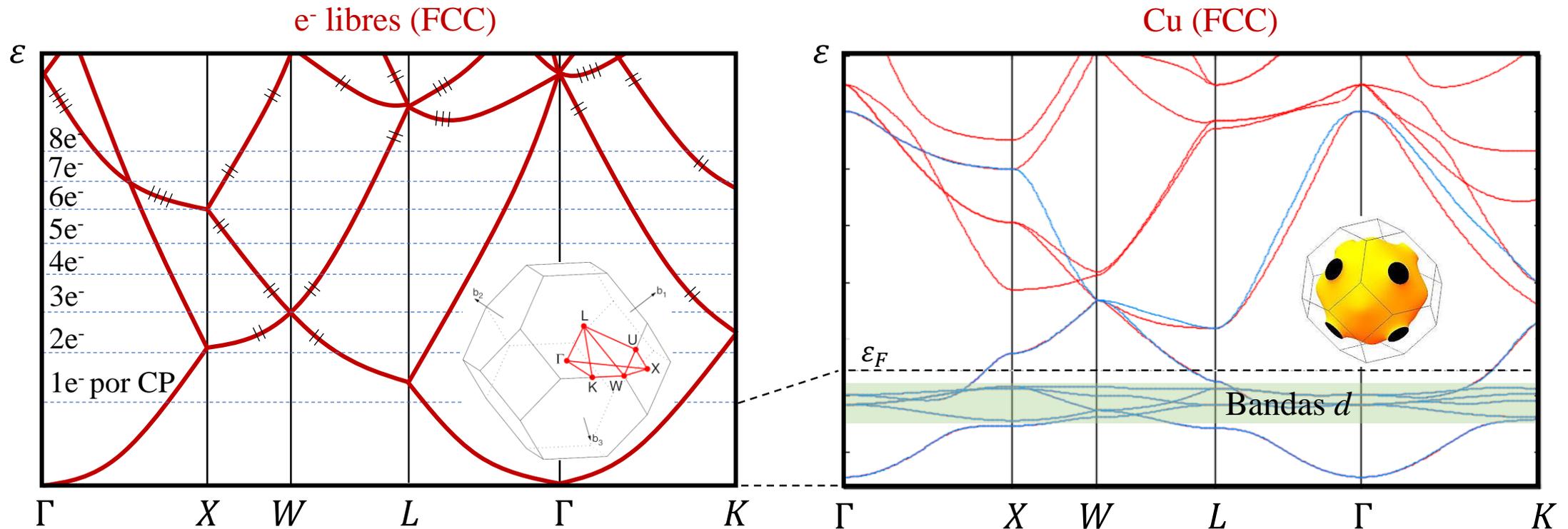
La superposición entre orbitales da lugar a la formación de bandas de energía.

Diagrama de bandas

Relación de dispersión para redes en 3D

En el caso de e^- libres, se grafican los valores de $\varepsilon_{\vec{k}-\vec{K}}^0 = \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} - \vec{K})^2$ para recorridos específicos de \vec{k} dentro de la 1ZB, considerando vectores \vec{K} en torno al origen.

Ejemplo: e^- libres en red FCC y comparación con el caso del Cu



Resumen

- Formación de bandas a partir de orbitales atómicos
- Modelo de enlaces fuertes (*Tight Binding*)
- Ejemplo en red 1D con base
- Propiedades generales de electrones en una banda de TB

