

Estructura de la Materia 2

Clase 9 - Teoría

Docentes

Gustavo Grinblat, Andrea Barral, Juan Herrera Mateos

Departamento de Física, FCEN, UBA – Curso de Verano, 2022

Web: <http://materias.df.uba.ar/edlm2a2022v>

Repaso

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

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

Índice de banda
 $\psi_{n\bar{k}}(\vec{r}) = e^{i\bar{k}\cdot\vec{r}} u_{n\bar{k}}(\vec{r})$ con $u_{n\bar{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = u_{n\bar{k}}(\vec{r})$
 $\in 1\text{ZB}$ y cumple con CCP de BvK

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

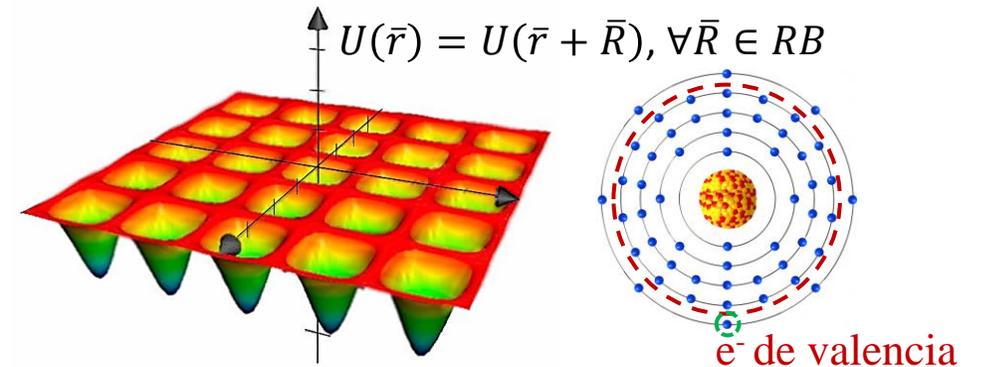
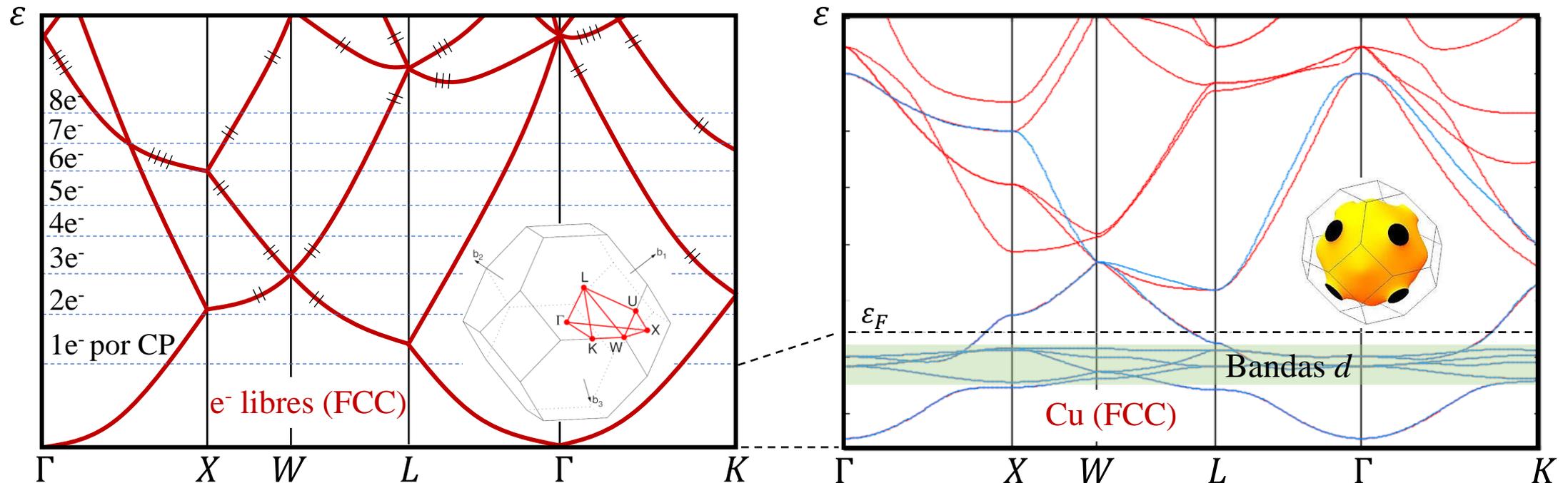
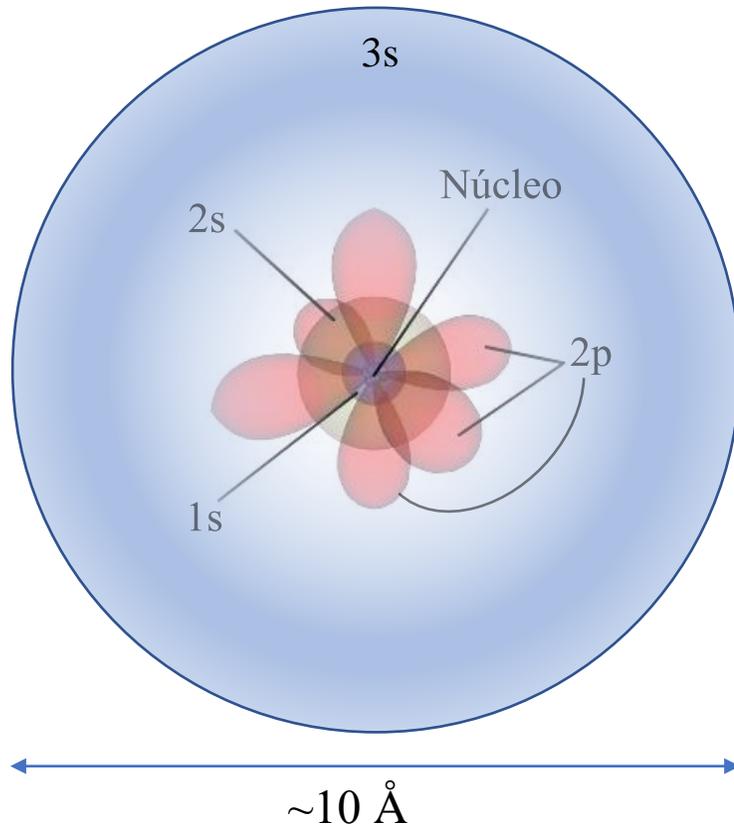


Diagrama de bandas: Comparación entre e⁻ libres (FCC) y e⁻ en Cu (FCC)

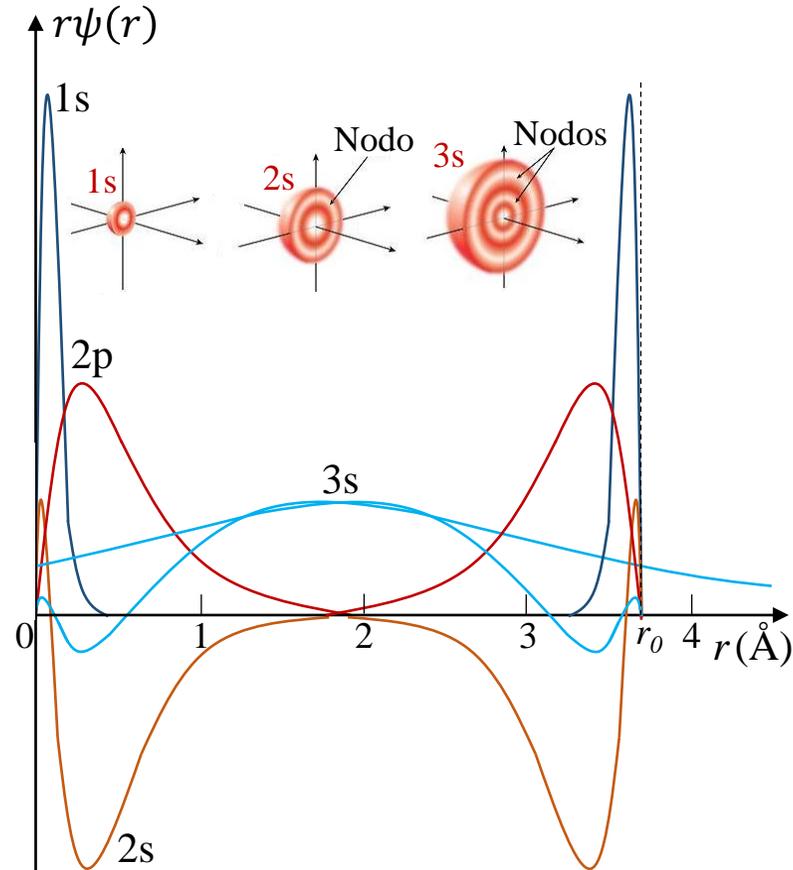


Formación de bandas a partir de orbitales atómicos

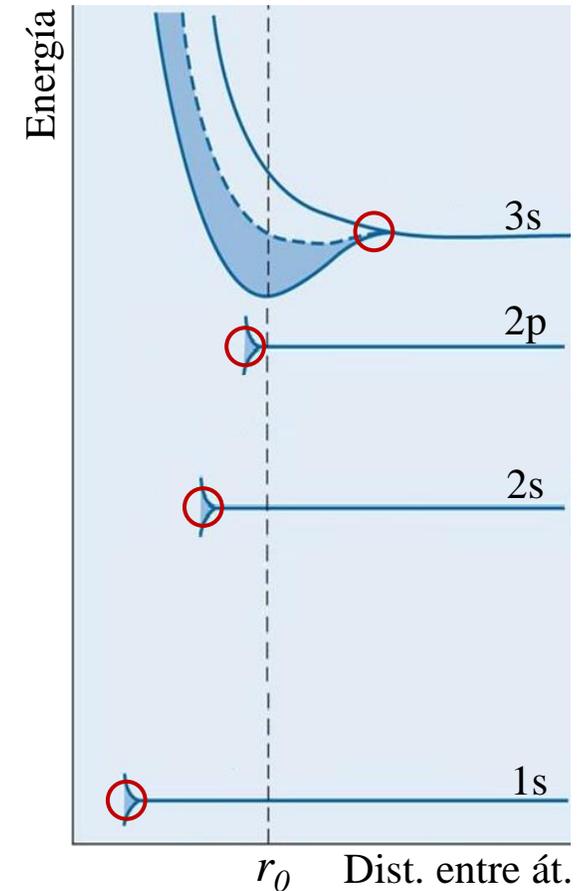
¿Qué sucede cuando acercamos átomos aislados para formar un cristal?: Ejemplo del Na



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.

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

