

- El libro es obligatorio.
- Habrá 3 parciales, el primero a finales de septiembre - principios de octubre.
- Trabajaremos con cristales (para nosotros será sinónimo de sólido), cuya periodicidad es lo que genera todas las propiedades estructurales.
- Más en detalle, un sólido está formado por núcleos y electrones. Nosotros hablaremos de iones y electrones de valencia.

INTRODUCCIÓN

• Trabajaremos sobre la base de la aproximación de Born-Oppenheimer o aproximación adiabática:

adiabática:

$$\begin{cases} m_e \sim 0.9 \cdot 10^{-30} \text{ Kg} ; m_p \sim 1.7 \cdot 10^{-27} \text{ Kg} \\ m_e \sim 0.5 \text{ MeV} ; m_p \sim 940 \text{ MeV} \sim 1836 \text{ eV} \end{cases}$$

$\Rightarrow$  el sistema nuclear, al tener más inercia, se mueve mucho más lentamente que el electrónico

$\Downarrow$   
estudiaremos el movimiento del electrón con los núcleos fijos

P.ej., molécula de  $H_2^+$ :

$$H = \frac{\vec{p}_e^2}{2m} + \underbrace{V(\vec{r}_e - \vec{r}_1) + V(\vec{r}_e - \vec{r}_2)}_{\text{la aproximación adiabática}}$$

parte que esto no depende del tiempo (de hecho se fijan los núcleos en el eje X, por inercia y es soluble de una variable)

Se sabe  $\rightarrow \Psi_{el}^m(\vec{r}_e) ; [el]^m(R)$   
(en solo espaciosa)  $\downarrow$  distancia INTERNUCLEAR

- En un sólido, se sabe que los iones son fijos y se estudian los electrones.
- Después, se estudia la evolución nuclear.

En el ejemplo del  $H_2^+$ :

$$H = \frac{p_1^2}{2m_p} + \frac{p_2^2}{2m_p} + \frac{e^2}{R} + E_{el}(R)$$

Los niveles de energía  
electrónicas, que DEPENDEN

DE R

↳ El movimiento del electrón es tan rápido y difuso que  
no da una especie de región de límites

no, queda un problema central de dos cuerpos

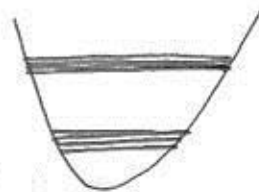
En general, en moléculas quedan niveles:

Vibracionales

$$E_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega$$

Rotacionales

$$E_l = \frac{L^2}{2I} = \frac{l(l+1) \hbar^2}{2I}$$



En el sólido va a parecer algo muy parecido: van a reaparecer los modos normales de vibración.

Al cuantizar aparecerá algo muy curioso que llamamos fonones: una partícula tan real (o igual) como el fotón.

Vamos a realizar, además, la aproximación de partículas independientes: despreciamos la interacción electrón-electrón y solo consideramos la interacción electrón-ión. Aunque clásicamente parece absurdo porque ambas interacciones del mismo orden de magnitud, cuánticamente surge de manera natural como consecuencia del principio de exclusión de Pauli.

Ahí, estamos ante un problema de un cuerpo:

$$H_e = \frac{\vec{p}_e^2}{2m_e} + V(\vec{r}_e) \quad \text{con } V \text{ periódico por ser la red}$$

↓  
habla de 1 cuerpo

Si no hacemos la aproximación de partículas libres, ocurre algo muy curioso: el espectro no es ni continuo ni discreto, es en bandas:

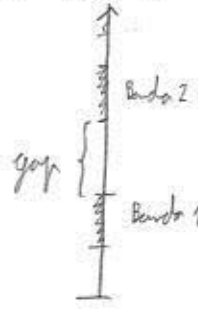
LIGADO



NO LIGADO



SÓLIDO EN POTENCIAL  $\Phi(r) = K_0$



(e. energía discretas, no discretas)

(Todo esto en la aproximación de electrones independientes)

Hay que tener en cuenta además que los electrones son fermiones: solo hay un electrón en cada estado cuántico. (curioso: el libro distingue entre estados y nivel)

No confundir entre estado de una partícula y estado del sistema. (e. el estado fundamental de un sistema no todos los  $e^-$  están en

curioso: el último nivel ocupado se le llama nivel de Fermi

Al ir llenando las bandas, el nivel de Fermi puede caer dentro de una banda o en el borde.

(igual que al llenar un átomo las capas pueden quedar llenas o no)

metal

energía / secundario  
debandas del gap y  
su relación con  $k_B T$   
notar que  $k_B T \approx \frac{1}{40} eV$   
 $\approx 25 meV$

En los 4 primeros temas hemos, además, la aproximación de partículas libres: despreciamos el potencial de interacción electrón-red. Esta aproximación funciona muy bien debido a sutiles

razones cuánticas.