Estado Solido

Tarea 2

Marco Antonio Rodríguez de León [1941556]

March 15, 2022

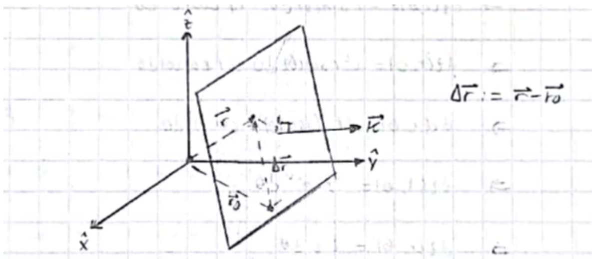
Instrucciones: Responder de manera detallada las preguntas formuladas en este cuestionario. Se debe apoyar cada respuesta, según el caso, con fórmulas y graficas esquematicas.

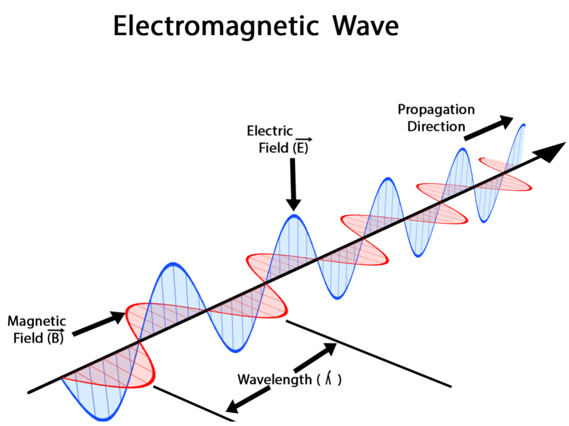
1.- Explicar: a) ¿Qué son las ondas planas? b) ¿Matematicamente, como se describen? c) Mencionar ejemplos de propagación de ondas planas.

Una onda plana se genera usando las superficies en la cual, la perturbación tiene una fase constante. Este tipo de ondas, son perpendiculares al vector de propagación de la onda.

Sea $\vec{k}$ el vector de propagación y $\Delta\vec{r}$ un vector en el plano de la onda. Dicha onda es plana si: $\vec{k} \cdot \Delta\vec{r} = 0$

Un ejemplo de propagación de ondas planas, es la generada por el campo electromagnetico: $\vec{k} \cdot \vec{E}_0 = 0$ y $\vec{k} \cdot \vec{B}_0 = 0$, puesto que las ondas se trasladan perpendicularmente al movimiento de la amplitud del campo.





2.- a) Explicar que son los números cuánticos y como se obtienen. b) Basándose en los números cuánticos, explicar cómo es el llenado de niveles electrónicos para conformar la tabla periodica.

Sea una función de onda, solución de la ecuación de Schrödinger: $\psi_n(x)$. Dado que el conjunto de soluciones de dichos sistemas cuánticos son parte de un espacio de Hilbert. Entonces su base es un conjunto ortonormal infinito: $\{\psi_n(x)\}$. Matematicamente son soluciones linealmente independientes caracterizadas por un parametro n.

En lo que respecta a la interpretación física, el/los número(s) cuánticos representan distintas cosas. Vease el caso del modelo del atomo de Hidrogeno, cuyas soluciones son de la forma: $\psi_{n,l,m}(r,\theta,\phi)$. Donde los números cuánticos representan:

i) $n \in \mathbb{N} = \{1, 2, 3, ...\}$: Este número cuánticos definen el nivel de energía principal en donde se encuentran los electrones. Tambien funciona para determinar la distancia media entre los niveles orbitales, y consigo obtener el volumen del orbital.

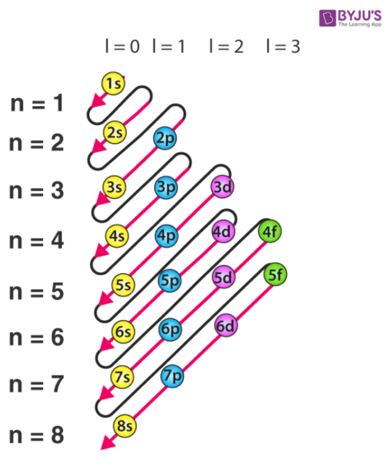
ii) $l \in [0, n-1] \subset \mathbb{N}$: Este número cuántico define la energía de los subniveles para cada nivel (n). Tambien determina la superficie de los orbitales.

iii) $m_l \in [-l, l] \subset \mathbb{Z}$: Este número cuántico representa la posible orientación de los distintos subniveles en el campo magentico. Aunado a lo anterior, con dicho número cuántico, se puede definir los orbitales.

iv) $s = \{-1/2, 1/2\}$: Este número cuántico define la orientación del electrón. Dado el principio de exclusión de Pauli, un nivel de energia puede contener a lo mas, dos electrones iguales pero con disitinta orientación.

La secuencia de llenado de los orbitales electronicos en el atomo, se realiza mediante los niveles de energía, la cantidad de electrones por nivel y orientación (spin). Esto mediante la siguiente secuencia:

$1s^2 \to 2s^2 \to 2p^6 \to 3s^2 \to 3p^6 \to 4s^2 \to 3d^{10} \to 4p^6 \to 5s^2 \to 4d^{10} \to 5p^6 \to 6s^2 \to 4f^{14} \to \cdots$

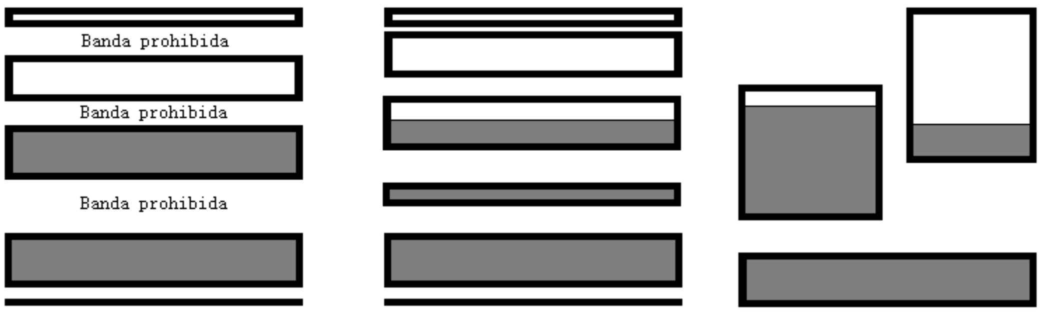


3.- Explicar qué es el nivel de Fermi.

La energía de Fermi, se define como: *"Energia del nivel lleno mas elevado en el estado fundamental del sistema con N electrones."* Mientras que el nivel de Fermi: *"Nivel de energia lleno mas alto con los N electrones acomodados."*. Es decir, el nivel de Fermi es aquel que funge como la cota minima maxima para la cual, los electrones de un sistema cuantico de particulas, pueden estar en su estado fundamental. Entiendase el estado fundamental como aquel donde se llenan todos los niveles en orden considerando el principio de exclusión de Paulli y la estructura de niveles.

4.- a) Explicar, en general, en qué consiste el concepto de estructura de bandas. b) ¿Cómo surge el teorema de Blöch? c) Explicar en que consiste el modelo de Kronick-Penney.

Los electrones en los cristales se distribuyen en bandas de energia, las cuales estan separadas por regiones en donde no existen orbitales electronicos. A dichas regiones se les conocen como: *bandas prohibidas*. Dichas estructuras de bandas, son diversas dependiendo del material, y cuyas anchuras de las bandas permitidas y prohibidas tambien varian dada la cantidad de electrones del sistema.



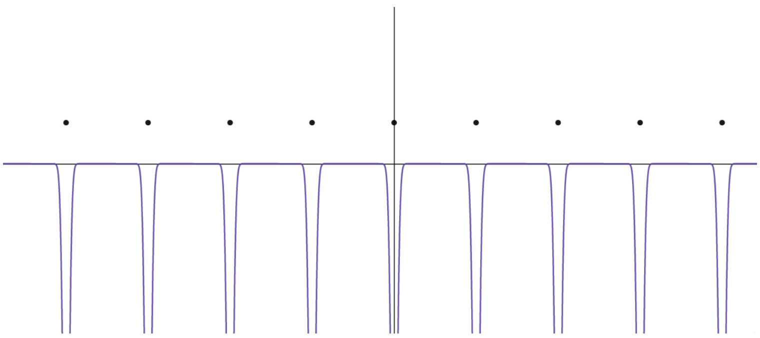
El teorema de Blöch describe que todas las funciones propias de la ecuación de Schrödinger para un potencial periodico (en nuestro caso el caracteristico de una red cristalina), son el producto de una onda plana: $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$, con una función que dicta la periodicidad: $u_k(\vec{r})$. Esto se puede resumir como: las funciones de onda para un potencial periodico (como los pozos de potencial), es de la forma:

$$\psi_k(\vec{r}) = u_k(\vec{r})e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

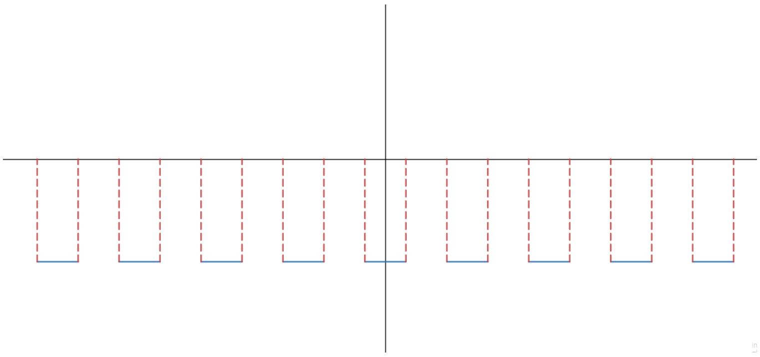
donde: $u_k(\vec{r}+\vec{T}) = u_k(\vec{r}) \;\; \forall \vec{r} \in \mathbb{R}^n$. Uno de los potenciales mas usado para estos modelos, son los de pozos de potenciales. Como por ejemplo:

$$V(x) = -\sum_{\forall n \in \mathbb{N}} \delta(x - nx_0)$$

Con x_0 la distancia entre dos electrones contiguos.



El modelo de Kronig-Penney realiza un analisis similar que el modelo de pozos de potenciales. Solo que, en lugar de utilizar funciones tipo: Delta de Dirac, simplifica las funciones mediante pozos cuadrados. Lo cual genera un conjunto de soluciones mas compactas, dada la facilidad de obtener las soluciones del pozo cuadrado de potencial.



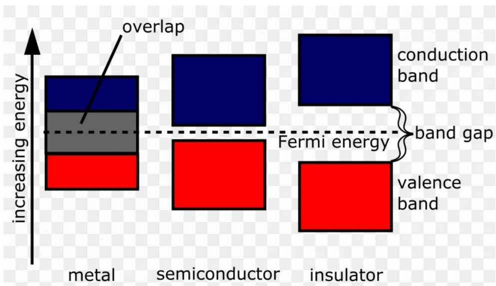
5.- a) En el contexto de estructura de bandas, explicar qué es la densidad de estados. b) Explicar que es el nivel de Fermi. c) En el contexto de estructura de bandas, ¿cómo se explica la diferencia entre un aislante, un semiconductor y un metal? c) Explicar qué es la masa efectiva.

Sea N el numero de electrones en un atomo. Se define la densidad de estados como la tasa de cambio de la cantidad de electrones por nivel de energía:

$$D(\varepsilon) = \frac{dN}{d\varepsilon}$$

Esto representa el numero de estados distintos en un nivel de energia para el cual los electrones pueden ocupar.

Sea un atomo con todos sus electrones en su nivel fundamental (capas llenadas en orden y satisfaciendo el principio de exclusion de Paulli). El nivel de energía tal que funge como una cota minima superior, se conoce como: energía de Fermi. Al nivel orbital correspondiente a dicha energia, se le llama energía de Fermi. El nivel de energía de Fermi, para la estructura de bandas, esta en la brecha entre el nivel de energia que contiene los electrones de valencia, y el nivel con energia con los electrones libres. Lo anterior para semiconductores y aislantes. Para los metales, como son elementos cuyo gap o brecha es sumamente pequeña, en su gran mayoria estan sobrelapadas la banda de conducción y la banda de valencia. Por tanto, el nivel de Fermi se encuentra entre esas bandas.



Los electrones de valencia son aquellos electrones que se encuentran en la ultima capa en su estado fundamental. Su correspondiente banda es la banda de valencia.

Con lo anterior, es facil observar la distinciones entre un semiconductor, un metal y un aislante. Los aislantes son elementos cuya brecha de banda entre el nivel de valencia y el nivel de conducción es sumamente grande. De forma que si un electron quiere transicionar a la banda de conducción, se requiere de mucha energía. Para los semiconductores, su ancho de banda entre los niveles anteriormente mencionados es menor a la de los aislantes. No obstante, sigue requieriendo una cantidad considerable de energia para que se pueda generar la transición. Finalmente, en los metales: su band gap es sumamente pequeño, de forma que los electrones pueden moverse libremente requiriendo muy poca energía. Por eso mismo, son los mejores conductores de electricidad.

La masa efectiva se define matematicamente como el cuadrado del inverso de la constante de Planck ($\hbar^{-2}$), multiplicada por la segunda derivada de la energía con respecto al vector de propagación:

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{d^2\varepsilon}{dk^2}$$

Dicha masa representa la masa que aparenta tener una particula para una correspondiente fuerza.