



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
ESCUELA NACIONAL DE ESTUDIOS SUPERIORES
UNIDAD MORELIA**



**PLAN DE ESTUDIOS DE LA LICENCIATURA EN
CIENCIA DE MATERIALES SUSTENTABLES
Programa de la asignatura**

Estructura Electrónica de los Materiales

Clave:	Semestre: 6°-8°	Campo de conocimiento: Física	No. Créditos: 7
Carácter: Optativa	Horas		Horas por semana
Tipo: Teórico-Práctica	Teoría: 12	Práctica: 3	15
Modalidad: Curso		Duración del programa: 4 semanas	

Seriación: No (x) Sí () **Obligatoria** () **Indicativa** ()

Asignatura antecedente: Ninguna

Asignatura subsecuente: Ninguna

Objetivo general:

Describir la estructura electrónica de los materiales y clasificarlos en función de sus propiedades.

Aplicar métodos modernos para calcular y predecir propiedades de los materiales.

Objetivos específicos:

1. Analizar las propiedades fundamentales de sistemas electrónicos en distintas dimensiones.
2. Identificar el intervalo de acción y límites de los diferentes modelos que se aplican a los materiales.
3. Describir modelos teóricos en el cálculo de propiedades de los materiales.

Índice Temático

Unidad	Tema	Horas	
		Teóricas	Prácticas
1	Introducción	2	0
2	La molécula diatómica	4	1
3	Sistemas finitos e infinitos	5	1
4	Sistemas bidimensionales y tridimensionales	7	2
5	Brecha de energía	4	1
6	Enlace s-p. El caso del silicio	5	1
7	Teoría del electrón libre	5	2
8	Propiedades de los metales dentro de la aproximación del electrón libre	5	1
9	Metales de transición	4	1
10	Introducción a la teoría cuantitativa moderna	4	1
11	Más allá de la teoría de bandas	3	1

Total de horas:	48	12
Suma total de horas:	60	

Contenido Temático	
Unidad	Temas y subtemas
1	Introducción 1.1. Revisión de algunos conceptos matemáticos asociados a la mecánica cuántica: <i>bras y kets</i> . 1.2. El átomo de hidrógeno. 1.3. Metales, semiconductores y aislantes.
2	La molécula diatómica 2.1. La molécula diatómica homonuclear. La molécula de hidrógeno. 2.2. La molécula diatómica heteronuclear. 2.3. Electronegatividad. 2.4. Energía de enlace y orden de enlace.
3	Sistemas finitos e infinitos 3.1. Cadenas moleculares y el espacio k . 3.2. Orden de enlace en un sistema infinito. 3.3. Densidad de estados local y total. 3.4. Bandas de energía y energía de enlace. 3.5. El teorema de los momentos. 3.6. La aleación binaria.
4	Sistemas bidimensionales y tridimensionales 4.1. El sólido visto como una molécula gigante. 4.2. La red cuadrada. 4.3. La red cúbica. 4.4. Las zonas de Brillouin para las redes fcc y bcc. 4.5. La ecuación de movimiento para un electrón bajo la presencia de un campo externo. 4.6. El concepto de hueco. 4.7. La superficie de Fermi. 4.8. La densidad de estados en cristales bidimensionales y tridimensionales. 4.9. La matriz de densidad, orden de enlace y la energía de enlace. 4.10. El teorema de los momentos aplicado a los cristales bidimensionales y tridimensionales.
5	Brechas de energía 5.1. La cadena infinita con dos estados s por átomo. 5.2. Brechas de energía en una cadena lineal de una aleación binaria. 5.3. Distorsiones de Peierls. 5.4. Metales, aislantes y el enlace metálico.
6	Enlace s - p . El caso del silicio 6.1. Enlace s - p entre dos átomos de silicio. 6.2. Dependencia angular de las integrales de saltos asociados a los enlaces s - p y p - p . 6.3. Híbridos sp . 6.4. Modelos simples de la estructura electrónica del silicio con coordinación tetraédrica. 6.5. Estructura de bandas del silicio empleando una base atómica mínima. 6.6. Orden de enlace y energía de enlace en el silicio empleando una base atómica mínima.
7	Teoría del electrón libre 7.1. Aproximación del electrón libre.

	<p>7.2. Electrones dentro de una caja. 7.3. Densidad de estados. 7.4. Bandas de energía en la aproximación del electrón libre y calculadas a partir de la combinación lineal de orbitales atómicos. 7.5. Modelo del electrón casi libre. 7.6. Pseudopotenciales. 7.7. Apantallamiento. 7.8. Correlación e intercambio.</p>
8	<p>Propiedades de los metales dentro de la aproximación del electrón libre 8.1. Estadística de Fermi-Dirac. 8.2. Potencial de contacto. 8.3. Calor específico electrónico. 8.4. Conductividad eléctrica. 8.5. Conductividad térmica. 8.6. La ley de Wiedeman-Franz. 8.7. Efecto Hall. 8.8. Energía de cohesión en metales simples. 8.9. Diferencias energéticas estructurales. 8.10. Aplicaciones.</p>
9	<p>Metales de transición 9.1. El modelo de Friedel. 9.2. Potenciales de Finnis-Sinclair. 9.3. Enlaces d-d. 9.4. Estructura cristalina en la familia de los metales de transición. 9.5. Enlace en las aleaciones metálicas. 9.6. Aplicaciones.</p>
10	<p>Introducción a la teoría cuantitativa moderna 10.1. La aproximación de Born-Oppenheimer. 10.2. Bosquejo de la teoría de funcionales de la densidad. 10.3. Algunas aplicaciones.</p>
11	<p>Más allá de la teoría de bandas 9.1. Electrones en metales no cristalinos. 9.2. La brecha energética en el silicio amorfo. 9.3. Localización electrónica. 9.4. Polarones. 9.5. Localización de Anderson. 9.6. Transición metal-aislante.</p>

Bibliografía básica:

Sutton, A.P. (1994). *Electronic structure of materials*. Reino Unido: Oxford Science Publications.
Harrison, W.A. (1975). *Electronic structures and the properties of solids*. USA: Dover Publications.
Taylor, P. & Heinonen, O. (2002). *A quantum approach to condensed matter physics*. United Kingdom: Cambridge University Press.
Chaikin, P.M. & Lubensky, T.C. (2000). *Principles of condensed matter physics*. United Kingdom: Cambridge University Press.

Bibliografía complementaria:

Ashcroft, N.W. & Mermin, N.D. (1976). *Solid state physics*. EUA: Holt-Saunders Co.
Kittel, C. (1997). *Introducción a la física del estado sólido*. (3ª ed.). Barcelona: Reverté.
McKelvey, J.P. (1980). *Física del estado sólido y semiconductores*. México: Limusa.
Economou, E. (2010). *The physics of solids. Essentials and beyond*. USA: Springer.

Rössler, U. (2009). *Solid state theory: an introduction*. (2nd ed.). USA: Springer.

Sugerencias didácticas:		Mecanismos de evaluación del aprendizaje de los alumnos:	
Exposición oral	(x)	Exámenes parciales	(x)
Exposición audiovisual	(x)	Examen final escrito	(x)
Ejercicios dentro de clase	(x)	Trabajos y tareas fuera del aula	(x)
Ejercicios fuera del aula	(x)	Exposición de seminarios por los alumnos	(x)
Seminarios	()	Participación en clase	(x)
Lecturas obligatorias	(x)	Asistencia	()
Trabajo de investigación	()	Seminario	()
Prácticas de taller o laboratorio	()	Otras:	()
Prácticas de campo	()		
Uso de tecnologías de la información y comunicación (videoconferencias, documentales, entre otros)	(x)		
Otras:	()		

Perfil profesiográfico:

Licenciado en Física, de preferencia con Doctorado en un área afín. Con experiencia docente.