

Introducción

Física nuclear trata energías del \sim MeV ; en física del sólido es de \sim eV
 Las columnas de la tabla periódica determinan el # de electrones de valencia. Son estos los responsables de las uniones químicas \rightarrow generarán conductores, aislantes, SC, ferromagnéticas, etc.

Fases son variedades alotrópicas en las cuales se presentan los elementos

Sólidos \rightarrow $\left\{ \begin{array}{l} \bullet \text{QM nR} \\ \bullet \text{Mecánica estadística} \end{array} \right.$
 distancias interatómicas $\sim \text{Å}$

Sólidos \rightarrow $\left\{ \begin{array}{l} \bullet \text{cristalinos: las posiciones de los átomos forman un conjunto ordenado [estructura cristalina]} \\ \bullet \text{amorfo: no tienen estructura ordenada. Vidrios, líquidos, plásticos, etc.} \end{array} \right.$

Una estructura cristalina es una disposición periódica de puntos en el espacio. Metales, sales y minerales tienen estructura cristalina.

- Orden de corto alcance: referidos a igual situación local en cada punto
- Orden de largo alcance: simetría de traslación

• Cristalográficamente

- Sólido cristalino (órdenes de corto & largo alcance)
- Sólido amorfo (orden de corto)
- Sólido desordenado (no hay orden)
- Sólido superordenado (varias periodicidades)

• Transporte:

- Sólido conductor
- " aislante
- " SC [$T=0$ es un aislante]

• Magnetismo:

- Sólido ferromagnético
- " Paramagnético
- " Diamagnético
- " Antiferromagnético

Redes Cristalinas

La caracterización cristalográfica usa rayos X. Considerando simetría de traslación define una red cristalina

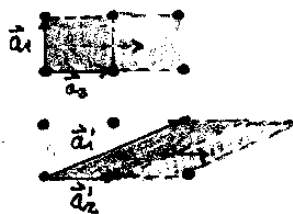
Red de Bravais: arreglo infinito de puntos discretos que aparece el mismo desde cualquier punto (en # coord. y en orientación es la misma situación)

Todo punto \vec{R} de la red se puede como:

$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$$

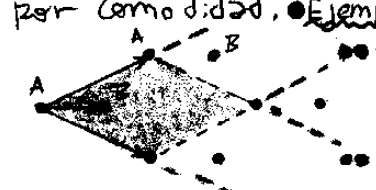
con $\{\vec{a}_i\}$ = vectores primitivos $n_i \in \mathbb{Z}$

Hay muchas $\{\vec{a}_i\}$; pero el área encerrada será la misma



Celda Primitiva: volumen en la red tal que sometido a traslaciones o través de los $\{\vec{a}_i\}$ llena todo el espacio sin overlap

Una estructura se puede dar también como una red de Bravais \oplus una base en los casos en que todos los puntos no conforman una red sino sólo un subconjunto o por comodidad. Ejemplo:



Estructura = Red Bravais \oplus $\left\{ \begin{array}{l} \vec{X}_B \\ \vec{0} \end{array} \right.$ la base

$\vec{r}_j = x_j \vec{a}_1 + y_j \vec{a}_2 + z_j \vec{a}_3$ $0 < x, y, z < 1$



Comprimidos x 14
 Suspensión x 30 y 60 ml.



Comprimidos x 14
 Suspensión x 50 y 90 ml.



Comprimidos x 14
 Suspensión x 50 ml

de Coordinación =
 # de Primeros Vecinos



Comprimidos x 16
 Suspensión x 60 ml.
 Suspensión x 90 ml.

Una sustancia compuesta en general no tiene suficiente simetría ni orden de largo alcance, así como no presenta estructura cristalina.



Comprimidos x 6
 Suspensión x 30 y 60 ml.



Comprimidos x 10 y 20



Ampollas de 1.200.000 U.I. x 1
 Ampollas de 2.400.000 U.I. x 1

La celda primitiva tiene 1 solo punto de la red (si no hay base)



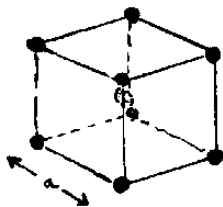
A la vanguardia en antibioterapia
 www.bago.com.ar

Las sustancias iónicas son buenos ejemplos de Red base

Celda de Wigner-Seitz: celda primitiva que tiene la simetría de la red. Es la región que se halla más cerca a un punto de la red que cualquier otro punto. Se construye por intersección de planos.

■ Redes Cúbicas

• BCC

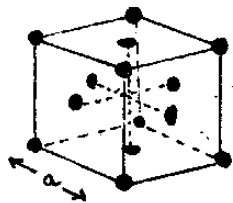


Volúmenes
específicos

$$8 \cdot \frac{1}{8} + 1 = 2 \rightarrow \boxed{V = \frac{a^3}{2}}$$

$$\#IV = 8$$

• FCC

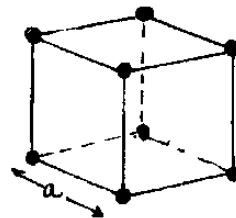


$$8 \cdot \frac{1}{8} + 6 \cdot \frac{1}{2} = 4 \rightarrow \boxed{V = \frac{a^3}{4}}$$

$$\#IV = 12$$

▲ La más densamente empaquetada

• SC



$$8 \cdot \frac{1}{8} = 1 \rightarrow \boxed{V = a^3}$$

$$\#IV = 6$$

Hay grupos puntuales cristalográficos según las simetrías puntuales.

$$\alpha = \beta = \gamma = \frac{\pi}{2} \quad a = b = c \rightarrow \text{BCC, FCC, SC (cúbicas)}$$

$$\alpha = \beta = \gamma = \frac{\pi}{2} \quad a \neq b \neq c \rightarrow \text{Ortorómbicas}$$

etc.

Las simetrías puntuales son operaciones tales que conservando un punto y sometiendo al cristal a una operación no cambian en nada su situación

Rotaciones en $\frac{2\pi}{n}$

Reflexiones

Inversiones

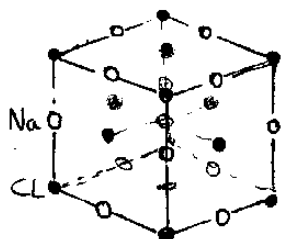
Rotación + Reflexión

Rotación + Inversión

■ Estructuras Iónicas

CLNa

Los FCC
desplazados

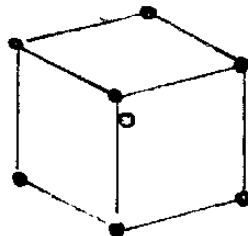


$$\text{Red SC } \oplus \begin{cases} 3 \text{ átomos CL} \\ \vec{0} \text{ CL} \\ 1 \text{ átomo Na} \end{cases}$$

$$\text{Red FCC } \oplus \begin{cases} \vec{0} \text{ CL} \\ 1 \text{ átomo Na} \end{cases}$$

CLCe

Es una
BCC



$$\text{Red SC } \oplus \begin{cases} 1 \text{ átomo (Ce)} \\ \vec{0} \text{ CL} \end{cases}$$

Además del $\vec{0}$, punto de la base será igual totalmente en la celda primitiva (cuando es un átomo diferente al de $\vec{0}$).

Cuando tengo átomos iguales al $\vec{0}$ en la base van tantos átomos como el # de átomos (contando las fracciones) que tengo en celda prim (sin describir con los a_i)

$$\text{CLNa} \rightarrow \text{SC (CL)} \rightarrow \text{tenga } \frac{\text{CL}}{\text{CL}} 4 \left(\frac{1}{2}\right) + 2 \left(\frac{1}{2}\right) = 3 \text{ átomos en base}$$

$$\frac{\text{Na}}{\text{Na}} 1 \text{ íntegramente en celda primitiva}$$

Potencial Periódico

Debido a la estructura cristalina consideraremos un potencial:

$$U(\vec{r} + \vec{R}) = U(\vec{r})$$

$\forall \vec{R} \in \text{Red de Bravais}$

Como la escala de la periodicidad es $\sim \text{\AA}$ \rightarrow necesitamos QM. La periodicidad perfecta es rara por:

- impurezas
- defectos por excitación térmica
- vibraciones de los átomos

Estas imperfecciones hacen que la σ no sea ∞ . Una situación más realista es:

$$U(\vec{r}) = U_{\text{periódico}} + \delta U$$

lo que rompe la periodicidad
entra como perturbación

Seguimos usando electrón independiente

$$\mathcal{H}\psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}) \right] \psi = \epsilon \psi \quad [1]$$

Hamiltoniano para 1 electrón en potencial $U(\vec{r})$ periódico

Electrón de Bloch: electrón ind. sujeto a U periódico

Teorema de Bloch: los autoestados del \mathcal{H} en [1] pueden elegirse como:

$$\psi_{nk}(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \cdot U_{nk}(\vec{r})$$

donde $U_{nk}(\vec{r})$ es periódica en la red. Las soluciones son ondas planas multiplicadas por un término periódico. Se puede ver como:

$$\psi_{nk}(\vec{r} + \vec{R}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \psi_{nk}(\vec{r})$$

De la demostración vemos que: las soluciones $\psi_{nk}(\vec{r})$ están asociadas a los \vec{k} que pertenecen a la red recíproca, pues se requiere

$$\vec{k} \cdot \vec{R} = 2\pi m \Rightarrow$$

$$\vec{k} = k_1 \vec{b}_1 + k_2 \vec{b}_2 + k_3 \vec{b}_3$$

donde $\vec{b}_i \cdot \vec{a}_j = 2\pi \delta_{ij}$

observación
Los k_i son # de onda de ondas planas que valen 1 en los sitios de la red
 $e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} = 1$

• La demostración usa que $[\hat{\mathcal{H}}, \hat{T}_{\vec{R}}] = 0$; donde $\hat{T}_{\vec{R}} \equiv$ operador de traslación

Planos Cristalinos

Contiene tres puntos de la red de Bravais (No colineales) \Rightarrow un plano es una red de Bravais 2D.

Una familia de planos es un conjunto de planos \parallel equiespaciados los cuales contienen todos los puntos de la red.

Teorema:

\forall familia de planos separados 'd' hay vectores \perp tales que el más corto mide $\frac{2\pi}{d}$

La red recíproca

Esto permite clasificar planos cristalinos

Indices de Miller: coordenadas del vector de la red recíproca normal al plano en cuestión más corto respecto de un set $\{\vec{a}_i\}$

Un plano con hkl es normal al:

$$\vec{R} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$$



Comprimidos x 14
Suspensión x 30 y 60 ml.



Comprimidos x 14
Suspensión x 50 y 90 ml.



Comprimidos x 14
Suspensión x 50 ml



Comprimidos x 16
Suspensión x 60 ml.
Suspensión x 90 ml.



Comprimidos x 10



Comprimidos x 6
Suspensión x 30 y 60 ml.



Comprimidos x 10 y 20



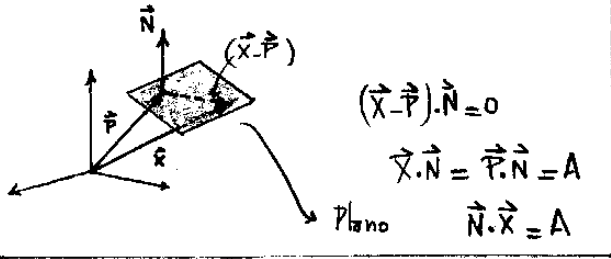
Ampollas de 1.200.000 U.I. x 1
Ampollas de 2.400.000 U.I. x 1



A la vanguardia en antibiocioterapia
www.bago.com.ar

Los índices de Miller son enteros y sin factores comunes. Veamos algo de su significado geométrico.

Sobre Planos



$$\begin{aligned} (\vec{X}-\vec{P}) \cdot \vec{N} &= 0 \\ \vec{X} \cdot \vec{N} &= \vec{P} \cdot \vec{N} = A \\ \vec{N} \cdot \vec{X} &= A \end{aligned}$$

$$\vec{K} \cdot \vec{X} = A$$

con $\vec{K} \in$ red recíproca
 $\vec{K} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3 \Rightarrow$

$$\left. \begin{aligned} \vec{K} \cdot \vec{a}_1 &= 2\pi h \\ \vec{K} \cdot \vec{a}_2 &= 2\pi k \\ \vec{K} \cdot \vec{a}_3 &= 2\pi l \end{aligned} \right\} \Rightarrow$$

si $\begin{cases} \vec{X} = x_1 \vec{a}_1 \\ \vec{X} = x_2 \vec{a}_2 \\ \vec{X} = x_3 \vec{a}_3 \end{cases}$
 setamos
 alternati-
 vamente

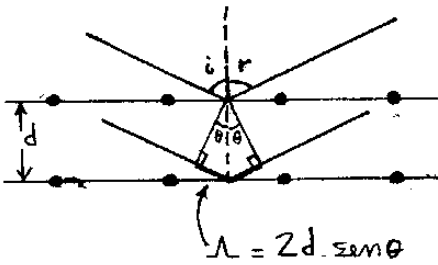
Entonces el plano interceptará a los vectores primitivos en: $(x_1 = \frac{A}{2\pi h}; x_2 = \frac{A}{2\pi k}; x_3 = \frac{A}{2\pi l})$

$$x_1 : x_2 : x_3 \rightarrow \frac{1}{h} : \frac{1}{k} : \frac{1}{l}$$

■ Difracción de Rayos X

Necesito examinar estructuras del orden del $\text{\AA} \Rightarrow \lambda \sim \text{\AA} \Rightarrow \nu = \frac{c}{\lambda} \rightarrow E \sim 10 \text{ keV}$
 Con neutrones y electrones no es tan conveniente.

En 1912 se ve que los cristales pueden hacer de redes de difracción. Bragg es el primero en estudiar el tema \rightarrow había picos para ciertos ángulos

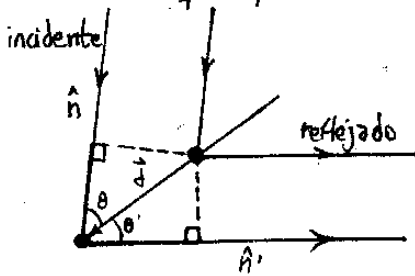


- Los rayos X se reflejan en los planos
- Condición de interferencia constructiva cuando:

$$\boxed{n\lambda = 2d \sin \theta} \quad n \in \mathbb{Z} \quad \text{cuando la distancia recorrida es múltiplo entero de } \lambda$$

Cada forma de orientar el cristal tendrá sus reflexiones particulares y hay ∞ orientaciones

Existe otro enfoque que es el de Von Laue:



$$\lambda = d \cos \theta + d \cos \theta'$$

La reflexión se produce en los iones

$$\vec{d} \cdot (\vec{k} - \vec{k}') = 2\pi m \Rightarrow \text{si toda la red interfiere constructivamente}$$

variación del vector de onda de la radiación incidente

$$\boxed{\vec{R} \cdot (\vec{k} - \vec{k}') = 2\pi m} \quad \forall \vec{R} \text{ de la red real}$$

$\Rightarrow \vec{R} \equiv \vec{k} - \vec{k}' \in$ red recíproca cuando hay interferencia constructiva

NOTA
 Hay picos de difracción para ciertos λ, d, θ tales que todos los radiadores interfieren constructivamente

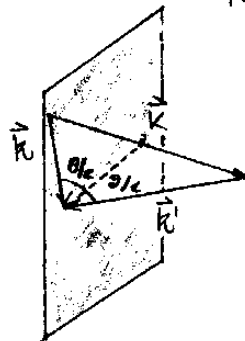
$$|\vec{k}| = |\vec{k}'| = \frac{2\pi}{\lambda}$$

Solo cambia en dirección el \vec{k}

$$\vec{R} = \vec{k} - \vec{k}' \rightarrow |\vec{R}| = \sqrt{|\vec{k}|^2 + |\vec{k}'|^2 - 2|\vec{k}||\vec{k}'| \cos \theta}$$

$$|\vec{k}'|^2 = 2|\vec{k}|^2 \sin^2 \left(\frac{\theta}{2}\right)$$

$$K = 2 \cdot k \cdot \sin \left(\frac{\theta}{2}\right)$$



$$\vec{R} \cdot \hat{K} = \frac{|\vec{R}|}{2}$$

La punta de \vec{k} y \vec{k}' se halla en un plano de Bragg

$$k = |\vec{k} - \vec{k}'|$$

$$k^2 = k^2 + k^2 - 2\vec{k} \cdot \vec{k}'$$

$$k^2 = 2\vec{k} \cdot \vec{k}'$$

$$\frac{k^2}{2} = \vec{k} \cdot \vec{k}'$$

$$\vec{k} \cdot \vec{k}' = \frac{k^2}{2}$$

$$|\vec{R}| = m \frac{2\pi}{d} = 2k \sin \theta$$

$$m \cdot \lambda = 2d \sin \theta$$

son equivalentes Bragg y Von Laue



Comprimidos x 14
Suspensión x 30 y 60 ml.



Comprimidos x 14
Suspensión x 50 y 90 ml.



Comprimidos x 14
Suspensión x 50 ml



Comprimidos x 16
Suspensión x 60 ml.
Suspensión x 90 ml.



Comprimidos x 10



Comprimidos x 6
Suspensión x 30 y 60 ml.



Comprimidos x 10 y 20

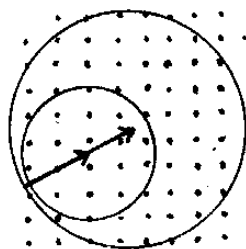


Ampollas de 1.200.000 U.I. x 1
Ampollas de 2.400.000 U.I. x 1

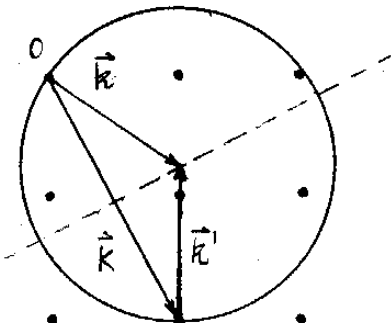


Hay varios métodos de hacer difracción con rayos X_{λ}

- Método de Laue: se barre un intervalo [con k fijo] de (λ_0, λ_1) y el cristal fijo.
Usamos la construcción de Ewald



$\vec{k}_0 \rightarrow \vec{k}_1$
 $\lambda_0 \rightarrow \lambda_1$
barremos la zona pintada



θ fijo
 λ varía

- esfera de radio $|\vec{k}|$ por O
- si algún punto cae en la esfera \Rightarrow vale Laue para ese punto pues $\vec{K} = \vec{k} - \vec{k}'$

- Método del cristal rotante: rayos X monocromáticos pero variamos el ángulo de incidencia rotando el cristal. La esfera de Ewald está fija pero rota la red recíproca, produciéndose picas en ciertos ángulos [cuando algún sitio toca la esfera]



λ fijo $\rightarrow k$ fijo
 θ varía

- Método de Debye-Scherrer: se usa polvo del cristal \Rightarrow debido a la orientación aleatoria el patrón combina todas las orientaciones del eje de rotación. Es un cristal rotante en el cual el eje de rotación varía en todas las direcciones.

■ La Red recíproca

La red recíproca es importante porque es lo que realmente "ve" cuando se hace un experimento de difracción. Puede definirse la red recíproca en el momento de hablar de difracción como consecuencia de ella.

{ \vec{b}_i } vectores primitivos de la red recíproca

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{V} \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3 \quad V = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{V} \cdot \vec{a}_3 \times \vec{a}_1$$

$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{V} \cdot \vec{a}_1 \times \vec{a}_2$$

La red recíproca puede definirse como el conjunto de \vec{K} tales que la onda plana tiene la periodicidad de la red real.

$$e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r})} = e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r} + \vec{R})} = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} = 1$$

$$1 = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \Rightarrow \vec{k} \cdot \vec{R} = 2\pi m$$

$$\boxed{k_1 n_1 + k_2 n_2 + k_3 n_3 = 2\pi m} \quad (s: \vec{b}_i \vec{a}_j = 2\pi \delta_{ij})$$

con $m \in \mathbb{Z}$

Primer zona de Brillouin: celda primitiva de Wigner-Seitz en la red recíproca.
El volumen de la celda primitiva es independiente del set $\{\vec{a}_i\}$.

■ Factores de estructura

En los casos de redes monoatómicas con base se tendrá asociada una diferencia de fase φ debida a la presencia de dos átomos (o más) por celda primitiva $(\vec{d}_i - \vec{d}_j) \cdot \vec{K} = \varphi$.

$$S_{\vec{K}} = \sum_{j=1}^n e^{i\vec{K} \cdot \vec{d}_j}$$

Esta suma es en la base

\vec{d}_j = ubicación del átomo j -ésimo de la base
 \vec{K} = vector general de la red recíproca

Cuando los átomos en la base no son idénticos tenemos un factor de forma atómico:

$$S_{\vec{K}} = \sum_{j=1}^n f_j(\vec{K}) e^{i\vec{K} \cdot \vec{d}_j}$$

En los casos de difracción aquellos h, k, l tales que $S_{\vec{K}} = 0$ no aportan a la interferencia constructiva. No todos los vectores \vec{K} de la red recíproca serán 'visibles' como picos de difracción.

Propiedades de Transporte

Queremos explicar la conducción de electricidad y calor



Comprimidos x 14
Suspensión x 30 y 60 ml.

$$\vec{j} = \sigma \vec{E}$$

Corriente

$$\vec{Q} = -K \vec{\nabla} T$$

Flujo de calor

Aproximación de Respuesta lineal

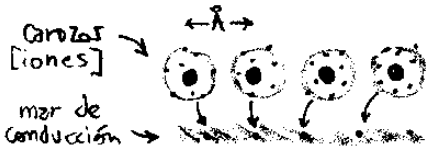
Modelo de Drude

Aplica teoría cinética de los gases a un metal \Rightarrow

Consideramos el metal como un 'gas' de electrones



Comprimidos x 14
Suspensión x 50 y 90 ml.



De los átomos se desprenden algunos de los electrones de valencia y pasan a formar parte de un mar de conducción.

N_A átomos/mol.

$$n = N_A Z \frac{\rho}{A} = \frac{N}{V}$$

densidad de electrones

definimos : $\frac{V}{N} = \frac{1}{n} = \frac{4}{3} \pi r_s^3$ radio de la esferita asociada a un electrón.

$r_s \approx 3a_0$ \rightarrow Densidad \gg gas clásico (en principio no se justifica fmb)

hipótesis:

- No hay interacción entre colisiones [electrón-ión] (positivo)
- Electrón libre (los e^- no ven la red de iones sino como un 'fondo')
- Electrón independiente (los e^- no se ven entre sí)
- Las colisiones se rigen por las leyes de Newton y son instantáneas (modifican \vec{v})
- La probabilidad de colisión por unidad de tiempo es de $1/\tau$

$\tau \equiv$ tiempo de relajación

(tiempo medio que tarda un e^- sin colisionar)

No depende de \vec{v} ni de \vec{E}

- EL electrón scatterea y thermaliza colisionando con los iones de la red.

$$\frac{1}{2} m \overline{v^2} = \frac{3}{2} k_B T + f_{MB}$$

NOTA: Implica $v_0(T=0) = 0$

$$\delta \mathcal{E} = -e \vec{v} \cdot \vec{E} t$$

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial v} = m v$$

$$\delta v = \frac{\partial v}{\partial \mathcal{E}} \delta \mathcal{E} = \frac{1}{m v} \cdot -e \vec{v} \cdot \vec{E} t \rightarrow \langle \delta \vec{v} \rangle = -\frac{e \vec{E} T}{m}$$

$$\vec{j} = -n e \langle \delta \vec{v} \rangle = \frac{n e^2 T}{m} \vec{E} \Rightarrow \sigma = \frac{n e^2 T}{m}$$

$$\sigma = \frac{1}{\rho} \leftarrow \text{resistividad}$$

$$\tau \approx 10^{-14} \text{ seg.} \leftarrow \text{tiempo de relajación}$$

$$\Lambda = v_0 \cdot \tau \rightarrow$$

$$\Lambda \sim 10 \text{ \AA} \leftarrow \text{Camino libre medio } (T_{MB})$$

$$v_0 \sim 10^7 \frac{\text{cm}}{\text{seg}} \leftarrow \text{velocidad media } (T_{MB})$$

La v_0 es un orden de magnitud menor que la experimental (T_{MB}) y no coincide a $T=0$. Dnde da a $T=0$ $v=0$ y $\Lambda=0$

$$\rho \propto \frac{1}{T} \quad \text{A mayor } T \text{ menor } \tau \Rightarrow \text{(Más colisiones)}$$

Un electrón pasa menos tiempo sin chocar



Comprimidos x 16
Suspensión x 60 ml.
Suspensión x 90 ml.

† Abandonaremos luego.



Comprimidos x 10



Comprimidos x 6
Suspensión x 30 y 60 ml.



Comprimidos x 10 y 20



Ampollas de 1.200.000 U.I. x 1
Ampollas de 2.400.000 U.I. x 1



El modelo de Drude funciona parcialmente para los elementos IA (1e- de valencia).

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = -\frac{p(t)}{\tau} + F(t)$$

Ecuación de momento de un electrón

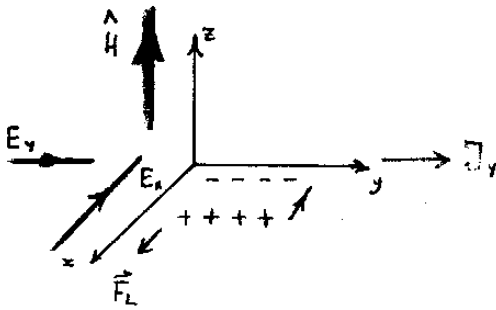
Prob. de no colisionar en un dt $(1 - \frac{dt}{\tau})$

$$\vec{p}(t+\delta t) = \left[1 - \frac{\delta t}{\tau}\right] (\vec{p}(t) + F(t))$$

MAGNETORESISTENCIA & COEF. HALL

Aplicamos $\begin{cases} E_y \rightarrow \text{tengo } J_y \\ H_z \end{cases} \rightarrow \text{los } e^- \text{ van en } -\hat{y} \text{ se genera un } E_x$

$$\vec{F}_L = -\frac{q}{c} \vec{v} \times \vec{H}$$



$$\rho(H) = \frac{E_x}{H}$$

Magnetoresistencia

$$R_H = \frac{E_x}{J_y H}$$

Constante Hall

Con $\frac{d\vec{p}}{dt} = 0 \rightarrow$

$$\frac{\vec{p}}{\tau} = -e\vec{E} - \frac{e}{c} \vec{v} \times \vec{H}$$

$$\frac{p_y}{\tau} = -eE_y - \frac{e p_x H_z}{mc}$$

$$\leftarrow \frac{p_x}{\tau} = -eE_x - \frac{e p_y H_z}{mc}$$

$$\vec{J} = -\frac{ne}{m} \vec{p}$$

$$-\frac{m J_y}{ne\tau} = -eE_y + \frac{J_x H}{nc}$$

$$-\frac{m J_x}{ne\tau} = -eE_x + \frac{J_y H}{nc}$$

$$J_x = 0 \rightarrow \frac{E_x}{J_y H} = -\frac{1}{enc} = R_H$$

Para elementos IA sale bien, pero no para metales.

El coeficiente Hall es negativo.

$$R_H = -\frac{1}{ne\tau}$$

Conductividad AC

* Ahora analizamos un campo $\vec{E}(t)$ pero uniforme en el espacio. Para AC se tiene:

$$\vec{J}(\omega) = \left(\frac{\sigma_0}{1 - i\omega\tau} \right) \vec{E}(\omega)$$

$$\sigma = \frac{ne^2\tau/m}{1 - i\omega\tau} \quad (\text{con } \omega \rightarrow 0 \text{ vamos a Drude DC})$$

Vala con $\lambda \gg \lambda_D$ (Podemos pensar $\vec{E} \neq \vec{E}(r)$)

Con este supuesto resolvemos Maxwell \rightarrow

$$\nabla^2 \vec{E} = -\omega^2/c^2 \epsilon \vec{E}$$

Ecuación de ondas para \vec{E}

$$\epsilon = 1 + \frac{4\pi i \sigma}{\omega}$$

constante dieléctrica

Con $\omega\tau \gg 1$

$$\epsilon = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}$$

$$\text{Con } \omega_p^2 = \frac{4\pi ne^2}{m} \quad [\text{frecuencia del plasma}]$$

$\omega_p > \omega$ La $E \in \mathbb{R}$ y $\epsilon < 0 \Rightarrow \vec{E}$ decae exponencialmente no penetra

$\omega_p < \omega$ La $E \in \mathbb{R}$ y $\epsilon > 0 \Rightarrow \vec{E}$ es oscilatorio hay propagación penetra el metal

Este modelo ajusta aproximadamente a la experiencia para los alcalinos.

Conductividad Térmica

El modelo de Drude explica la ley empírica de Wiedemann & Franz. Se asume que la conductividad térmica es debida a los electrones.

$$\frac{K}{\sigma} \propto T$$

(cociente entre conductividades)

[Para metales se obtiene

$$\# \text{ de Lorentz} \rightarrow \frac{K}{\sigma T} \sim 2-3]$$

Se llega a:

$$K = \frac{1}{3} N v C_v$$

Metiendo: $C_v = \frac{3}{2} n k_B$ y EM2 (5)

$$\frac{1}{2} m v^2 = \frac{3}{2} k_B T$$

$$\rightarrow \frac{K}{\sigma T} = 1.1 \cdot 10^{-8} \frac{W \cdot \Omega}{K^2} \leftarrow \text{Bastante bien}$$

C_v 100 veces mayor
 v 100 veces menor } ← Errores drude que se compensaron



Comprimidos x 14
Suspensión x 30 y 60 ml.



Comprimidos x 14
Suspensión x 50 y 90 ml.



Comprimidos x 14
Suspensión x 50 ml



Comprimidos x 16
Suspensión x 60 ml.
Suspensión x 90 ml.

Acomoda N electrones en los primeros N niveles de un electrón libre con BC Born-



Comprimidos x 10
Von Kármán



Comprimidos x 6
Suspensión x 30 y 60 ml.



Comprimidos x 10 y 20



Ampollas de 1.200.000 U.I. x 1
Ampollas de 2.400.000 U.I. x 1



A la vanguardia en antibioticoterapia
www.bago.com.ar

Teoría de los Metales de Sommerfeld

Drude usa $f_{MB} \rightarrow C_v = \frac{3}{2} k_B$ por electrón (no observada)

Como QM se ve que el principio de exclusión pide:

$$f_{MB} \rightarrow f_{FD} = \frac{1}{e^{\beta(E-\mu)} + 1} \rightarrow n = \int d^3v f_{FD}(v)$$

Sommerfeld considera un gas de electrones libres e indeptes. cuánticos. Arrancamos a $T=0$ (igualmente També es muy similar pues f_{FD} apenas varía en ese rango). Pensamos N electrones en V llenando niveles energéticos de acuerdo a Pauli \rightarrow calculamos los niveles de 1 electrón y los llenamos con N

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$$

- $\psi(x,y,z) = \psi(x+L,y,z)$
- $\psi(x,y,z) = \psi(x,y,L,z)$
- $\psi(x,y,z) = \psi(x,y,z+L)$

$$\Rightarrow \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{L^{3/2}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \vec{p} = \hbar \vec{k}$$

$$1 = \int |\psi|^2 d^3r$$

Los $\psi_{\vec{k}}$ son autoestados del operador \vec{p} . Las CC llevan a discretización de los \vec{k}

$$k_i = \frac{2\pi n_i}{L} \quad n_i \in \mathbb{Z}; \quad i=x,y,z$$

Una región (grande respecto a $2\pi/L$) del espacio k contiene:

$$\# \text{ k's permitidos por unidad de volumen} = \frac{L^d}{(2\pi)^d}$$

Metiendo N electrones en los niveles de un electrón:

$$1 \vec{k} \rightarrow 2 \text{ estados electrónicos } (\uparrow, \downarrow)$$

ocupo hasta un \vec{k}_F (de Fermi) tal que define una esfera con

$$V = \frac{4}{3} \pi k_F^3 \Rightarrow \# \text{ electr. permitidas} = 2 \cdot \left(\frac{4}{3} \pi k_F^3 \right) \frac{L^3}{8\pi^3}$$

$$\frac{N}{L^3} = n = \frac{k_F^3}{3\pi^2}$$

EL estado fundamental ($T=0$) de N electrones tiene todas los niveles 1-e hasta k_F ocupados y los subsiguientes vacíos.

Los únicos electrones que conducen son los ubicados en la superficie de Fermi



$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$$

$$v_F = \frac{\hbar}{m} k_F \sim 10^8 \frac{\text{cm}}{\text{seg}}$$

$$v_F \sim 1\% c$$

A $T=0$ Los electrones tienen velocidad importante.

con $T=0$ es $f_{FD} = \begin{cases} 1 & k < k_F \\ 0 & k > k_F \end{cases}$

$$E = 2 \sum_{k < k_F} \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

EL PASO al continuo

$$\sum_k f(k) = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^d \sum_k f(k) \Delta k$$

$$= \left(\frac{L}{2\pi}\right)^d \int f(k) dk$$

$\Delta k \rightarrow 0$
 $V \rightarrow \infty$
 $v. \Delta k \rightarrow \left(\frac{1}{2\pi}\right)^d$

$$E = 2 \left(\frac{L}{2\pi}\right)^d \int d\vec{k} \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$E = 2 \left(\frac{L^3}{8\pi^3}\right) 4\pi \int_0^{k_F} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} dk$$

$$E = \frac{L^3}{\pi^2} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{k_F^3}{3} \rightarrow \frac{E}{V} = \frac{1}{\pi^2} \frac{\hbar^2 k_F^3}{10m} \rightarrow \frac{E}{V} \cdot \frac{V}{N} = \frac{E}{N} = \frac{1}{\pi^2} \frac{\hbar^2 k_F^3}{10m} \frac{3\pi^2}{k_F^3}$$

$$\frac{E}{N} = \frac{3}{10} \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{3}{5} E_F \rightarrow \boxed{E = \frac{3}{5} E_F}$$

$E_F \equiv k_B T_F$ con $T_F \sim 10^4 K \rightarrow$

$$\boxed{E = \frac{3}{5} k_B T_F} \quad (T=0)$$

$$\boxed{E_{clásica} = \frac{3}{2} k_B T}$$

$E_{clásica} = 0 \quad (T=0)$

Energía por partícula

Observación
Tenemos Energía a $T=0$, cosa totalmente contra la intuición de gas ideal pero a favor del experimento.

\Rightarrow $E(T=0) \approx E_{clásica}(T \sim 10^4 K) \Rightarrow T_{AMB}$ es $\sim T=0$ para un metal y este esquema funciona aproximadamente

Nota: Dado que $E \propto k^2 \Rightarrow$ los electrones más débilmente ligados son los que tienen el $k=k_F$
 \Rightarrow Por ello decimos que la conducción la realizan los electrones que viven en la superficie de Fermi. Para elementos IA la sup. de Fermi es esférica; mientras que para Cu, Ag, Au [nobles] es casi esférica. Estos elementos tienen un solo electrón de valencia débilmente unido.

$$\beta = \frac{1}{\alpha} = -V \frac{\partial P}{\partial V}$$

Módulo de Bulk es la inversa (negativa) de la compresibilidad. Da según el rango para algunos metales, con lo cual estos electrones representan una parte importante de las propiedades elásticas.

Densidad de Estados

Número de estados por unidad de volumen por unidad de energía

de estados entre k y $k+\delta k$ $\rightarrow \frac{2}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3} \left(\frac{4\pi}{3}\right) 3k^2 \delta k = 2 \frac{4\pi k^2}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3} \delta k \equiv \delta N(k)$

Pasamos al # de estados entre E y $E+\delta E$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \rightarrow dE = \frac{\hbar^2}{2m} 2k dk$$

$$N(E) = 2 \frac{4\pi \sqrt{2} \sqrt{E} m^{3/2}}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3 \hbar^3} dE$$

$$\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = k$$

$$\frac{m}{\hbar^2} dE = k dk$$

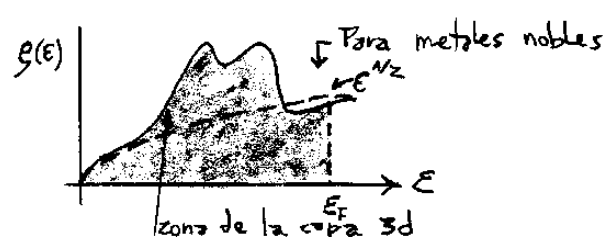
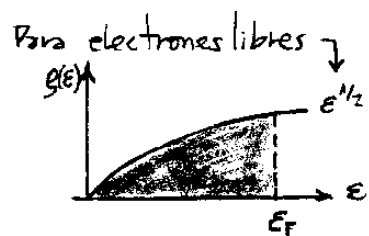
$$\sqrt{2mE} \frac{m}{\hbar^3} dE = k^2 dk$$

$$N(E) = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} E^{1/2} dE$$

$$\boxed{g(E) = \frac{dn}{dE}}$$

$$D(E) = \frac{dN}{dE}$$

$$\boxed{g(E) = \frac{N(E)}{V \delta E} = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} E^{1/2}}$$



La densidad de estados $g(\epsilon)$ aparece en las integrales debido a que:

$$N = \int dn = \int \left(\frac{dn}{d\epsilon} \right) d\epsilon \quad (\text{a } T=0)$$

$$N = \int \left(\frac{dn}{d\epsilon} \right) f_{FD}(\epsilon) \cdot d\epsilon \quad (\text{a } T \neq 0)$$

$$N = \int d\epsilon \cdot \square \cdot f_{FD}(\epsilon) \quad E = \int d\epsilon \cdot \square \cdot \epsilon \cdot f_{FD}(\epsilon) \quad \leftarrow \text{Tambi\u00e9n aparece en } E$$

donde \square son factores del pasaje al continuo y de la relaci\u00f3n de dispersi\u00f3n $\epsilon = \epsilon(k)$

Propiedades T\u00e9rmicas

Para un gas ideal cl\u00e1sico

$$C_V = \frac{3}{2} n k_B$$

Es 100 veces mayor que el C_V experimental

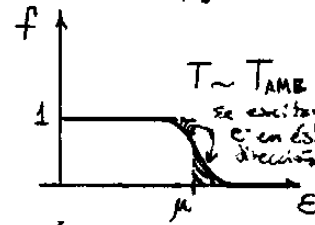
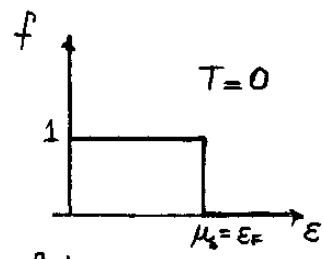
Para un gas de electrones libres e independientes. T se halla en:

la dependencia de E con

$$f_{FD}(\epsilon) = \frac{1}{e^{(\epsilon - \mu)/k_B T} + 1}$$

La integral de la energ\u00eda es ahora:

$$\epsilon = \frac{E}{V} = \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon \underbrace{g(\epsilon)}_{\text{densidad de estados}} \cdot \epsilon \cdot f_{FD}(\epsilon)$$



$$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_V$$

Usando un lema de Sommerfeld:

$$\int_0^{\infty} \frac{\Phi(x) \cdot dx}{e^{x-\xi} + 1} \approx \int_0^{\xi} \Phi(x) \cdot dx + \frac{\pi^2}{6} \frac{d\Phi}{dx} \Big|_{\xi} + \frac{7\pi^4}{360} \frac{d^3\Phi}{dx^3} \Big|_{\xi}$$

se tiene:

$$C_V = \frac{\pi^2}{2} \left(\frac{k_B T}{\epsilon_F} \right) n k_B \Rightarrow C_V \propto T \rightarrow \text{con } T \text{ bajas}$$

Comparando con el C_V cl\u00e1sico vemos que a T_{amb} $C_V = \frac{1}{100} C_V^{cl\u00e1sico}$

Este C_V que estamos analizando es la contribuci\u00f3n de los electrones solamente.

Con T m\u00e1s altas hay aportes a C_V de otros grados de libertad (los grados de libertad i\u00f3nicos van como T^3 y para $T=0$ el aporte es mucho menor que los grados de libertad electr\u00f3nicos).

Estos resultados andan bien para IA, los metales alcalinos y los nobles (Cu, Ag, Au); sin embargo no funciona para ciertos elementos pesados donde las electrones de conducci\u00f3n ^{NO} se comportan como electrones libres.

EL Modelo de electr\u00f3n libre $\oplus f_{FD}$ a\u00fan adolece de problemas como:

- Coeficiente de Hall
- Magnetoresistencia
- Ley de Wiedemann-Franz
- No se predice existencia de SC

TRIFAMOXIBL DUO
Amoxicilina + Sulbactam

Comprimidos x 14
Suspensi\u00f3n x 30 y 60 ml.

TRIFAMOX DUO
Amoxicilina

Comprimidos x 14
Suspensi\u00f3n x 50 y 90 ml.

TRIFAMOX DUO
Amoxicilina + Ambroxol

Comprimidos x 14
Suspensi\u00f3n x 50 ml

SEPTILISIN
Cefalexina Bago

Comprimidos x 16
Suspensi\u00f3n x 60 ml.
Suspensi\u00f3n x 90 ml.

SEPTICIDE
Ciprofloxacina Bago

Comprimidos x 10

Sommerfeld solucion\u00f3 el problema del C_V

VIXCEF

Comprimidos x 6
Suspensi\u00f3n x 30 y 60 ml.

UROSEPTAL
NORFLOXACINA

Comprimidos x 10 y 20

Pen Di Ben
Penicilina Benzatinica

Ampollas de 1.200.000 U.I. x 1
Ampollas de 2.400.000 U.I. x 1

Bago
A la vanguardia en antibi\u00f3ticoterapia
www.bago.com.ar

Electrones casi-libres

Hay que abandonar la hipótesis de electrón-libre \Rightarrow los electrones sienten un $U(\vec{r})$ periódico dado por los núcleos.

Tenemos funciones de Bloch como solución:

$$\psi_{nk}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} U_{nk}(\vec{r}) \quad \text{y} \quad \psi_{nk}(\vec{r}+\vec{R}_i) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_i} \psi_{nk}(\vec{r})$$

Es conveniente meter condiciones de contorno periódicas Born-Von Karman

$$BC \begin{cases} \bullet \psi(\vec{r} + N_i \vec{a}_i) = \psi(\vec{r}) & i=1,2,3 \\ \bullet N = N_1 \cdot N_2 \cdot N_3 & \# \text{ de celdas primitivas del cristal} \end{cases}$$

Esto lleva a:

$$e^{i \sum N_i k_i a_i} = 1 \Rightarrow k_i = \frac{m_i}{N_i} \quad m_i \in \mathbb{Z}$$

donde $\vec{K} = k_1 \vec{b}_1 + k_2 \vec{b}_2 + k_3 \vec{b}_3$ pertenece a la red recíproca

Se han discretizado los \vec{K} de la $\psi_{nk}(\vec{r})$

$$\vec{K} = \sum_i \frac{m_i}{N_i} \vec{b}_i$$

$$\Delta \vec{K} = \frac{\vec{b}_1}{N_1} \cdot \left(\frac{\vec{b}_2 \times \vec{b}_3}{N_2 N_3} \right) = \frac{1}{N} \frac{(2\pi)^3}{V}$$

$$\Delta \vec{K} = \frac{(2\pi)^3}{V}$$

Volumen del espacio recíproco por valor de \vec{K} permitidos

Volumen específicos de los \vec{K} permitidos

$$\Delta \vec{K} = \frac{1}{N} \cdot V^{-1}$$

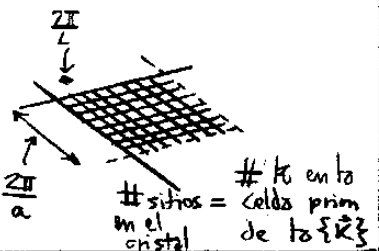
volumen de la celda primitiva en la red recíproca
de sitios de la red

volumen de una celda primitiva

El # de vectores \vec{K} permitidos en una celda de la red recíproca es igual al # de sitios en el cristal

Sobre la Discretización

$$\Delta \vec{K} = \frac{1}{N} \frac{(2\pi)^3}{a^3}$$



Las ondas planas son base completa para las soluciones $\psi_{nk}(\vec{r})$
 \oplus Born-Von Karman. Asimismo $U(\vec{r})$ se puede expandir también.
 Fijamos $U_0 = 0$ y se llega a:

Set de Ecuaciones \rightarrow

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} - \vec{K})^2 - \epsilon \right] C_{\vec{k}-\vec{K}} + \sum_{\vec{K}'} U_{\vec{K}-\vec{K}'} C_{\vec{k}-\vec{K}'} = 0 \quad [1]$$

$$U_{\vec{k}} \neq 0 \Leftrightarrow \vec{k} \in \{\vec{R}\}$$

$$\text{donde: } \begin{cases} \psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{q}} c_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \\ U(\vec{r}) = \sum_{\vec{K}} U_{\vec{K}} e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}} \end{cases}$$

Para \vec{k} fijo (en la 1ZB) las ecuaciones acoplan los $C_{\vec{k}}$ cuyos vectores de onda difieren de \vec{k} en un vector $\in \{\vec{R}\}$.
 $\vec{k}, \vec{k}-\vec{K}, \vec{k}-\vec{K}', \dots$

Problema original \rightarrow N problemas independientes (1 por cada $\vec{k} \in 1ZB$)

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{K}} C_{\vec{k}-\vec{K}} e^{i(\vec{k}-\vec{K})\cdot\vec{r}}$$

La [1] da origen al llamado diagrama de bandas. La reducción a la 1ZB se hace con el

$$\vec{q} = \vec{k} - \vec{K} \rightarrow \vec{q} \in \{\vec{R}\}$$

\vec{q} no en la 1ZB se para $\vec{K} \in 1ZB$

Consecuencias de los electrones de Bloch

- A. $\vec{k} \neq \alpha \vec{p} \Rightarrow$ autoestados de \hat{H} no son de \hat{p}
- B. Trabajo en la 1ZB \Rightarrow el \vec{q} de Bloch está confinado
- C. $\forall \vec{k} \in 1ZB$ existen 'n' soluciones de la ecuación de Schr. continuas en k
- D. $E_n(\vec{k})$ son periódicas en \vec{k} con periodicidad \vec{K}

$$E_n(\vec{k}) = E_n(\vec{k} - \vec{K})$$
 \Rightarrow define bandas de energía
- E. Lleno niveles de acuerdo a Pauli y la superficie de Fermi, que no es esférica en general \Rightarrow puede haber $R_H > 0$
- F. $E_F = \mu(T=0)$ en un metal \rightarrow no depende de k



Comprimidos x 14
Suspensión x 30 y 60 ml.



Comprimidos x 14
Suspensión x 50 y 90 ml.



Comprimidos x 14
Suspensión x 50 ml.



Comprimidos x 16
Suspensión x 60 ml.
Suspensión x 90 ml.



Comprimidos x 10



Comprimidos x 6
Suspensión x 30 y 60 ml.



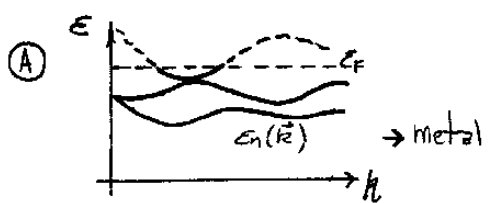
Comprimidos x 10 y 20
Si la banda está llena \Rightarrow



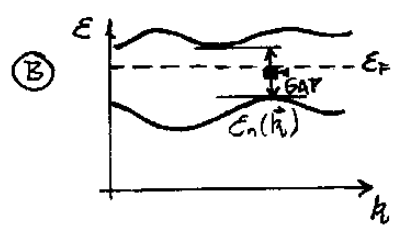
Ampollas de 1.200.000 U.I. x 1
Ampollas de 2.400.000 U.I. x 1

Decimos 2n porque con spin $1/2 \rightarrow n=1$
spin $3/2 \rightarrow n=2$ ($3/2, 1/2, -1/2, -3/2$)
etc. **Bago**
A la vanguardia en antibiocioterapia
www.bago.com.ar

banda totalmente llena \Rightarrow
 $\forall \vec{k} \in 1ZB$ tengo todos los electrones
($2 \cdot N_q$), que puedo tener



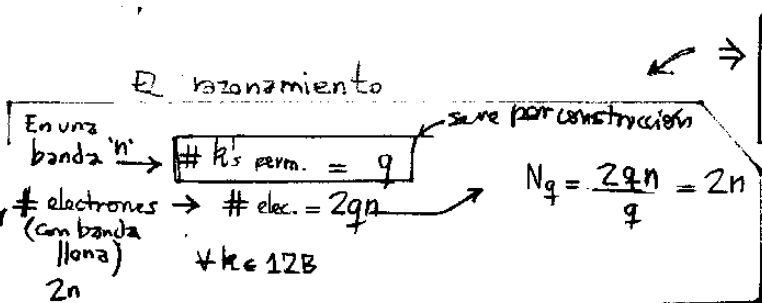
Llega a niveles desocupados con leves excitaciones en \vec{k}



No llega a niveles desocupados desde banda E_n

\rightarrow aislante \rightarrow si $G \gg k_F T_{AMB}$
 \rightarrow SC intrínseca \rightarrow si $G \approx k_F T_{AMB}$

El estado fundamental de Nelectrones de Bloch se construye ocupando todas los niveles de 1 electrón con los # n, \vec{k} (1ZB). En el llenado puede suceder: (A) bandas parcialmente llenas
(B) bandas totalmente llenas o totalmente vacías



[una banda tot. llena tendrá un # par. de electrones \Rightarrow un aislante requiere un # de electrones par celda primitiva par]

Cada banda albergará $2n$ electrones con $q = \#$ celdas primitivas en el volumen E_{orn} Von Karman
La superficie de Fermi ya no es esférica cuando hay $U(F)$

par de electrones en celda primitiva \Rightarrow Puede tener conductor o aislante
impar de electrones en celda primitiva \Rightarrow Siempre conductor

$$k_F = \left(\frac{3\pi^2}{a^3} N_q \right)^{1/3}$$

\rightarrow # de electrones por celda primitiva (caso 3D)

Bandas del electrón Libre

* En 1D se tiene:

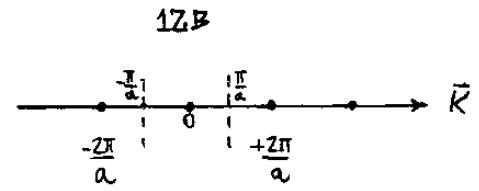
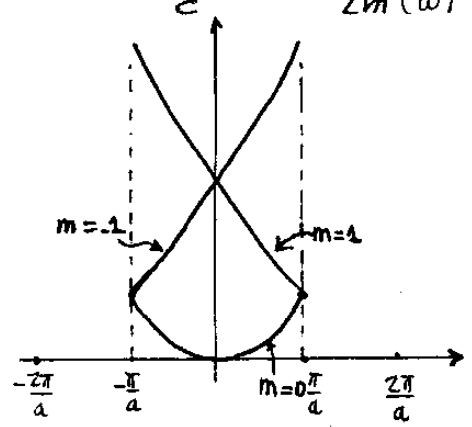
$$\mathcal{E}(\vec{q}) = \frac{\hbar^2 q^2}{2m}$$

$$\mathcal{E}(k) = \frac{\hbar^2 (k - K)^2}{2m}$$

$$\mathcal{E}(\tilde{k}) = \frac{\hbar^2 \left(\frac{2\pi}{a}\right)^2 [\tilde{k} - m]^2}{2m}$$

$$\vec{K}_n = a n \hat{x} \quad n \in \mathbb{Z}$$

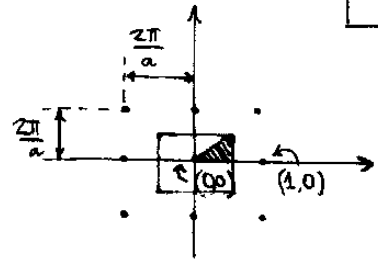
$$\vec{K}_m = \pm \left(\frac{2\pi}{a}\right) m \hat{x} \quad m \in \mathbb{Z}$$



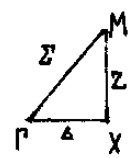
Las soluciones fuera de la 1ZB se rebaten sobre la misma

* En 2D se tiene:

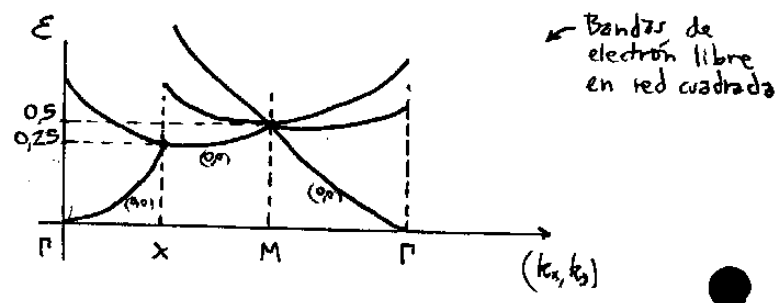
$$\mathcal{E} = \frac{\hbar^2}{2m} \left[(k_x - K_x)^2 + (k_y - K_y)^2 \right]$$



En 2D se grafican direcciones de alta simetría: se usa por convención la primera zona irreducible. Por simetría esta zona es equivalente a las otras siete



Se evalúa para \vec{K} cercanos que serán los que dan los valores de \mathcal{E} más bajos



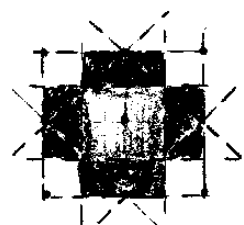
\vec{K}	(0,0)	(1,0)
$\Gamma = (0,0)$	0	1
$X = (\frac{1}{2}, 0)$	1/4	1/4
$M = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	1/2	1/2

en unidades de $\frac{\hbar^2 \left(\frac{2\pi}{a}\right)^2}{2m} \approx \tilde{\mathcal{E}}$

en unidades de $\left(\frac{2\pi}{a}\right)$

Zonas de Brillouin

La 1ZB se traza tomando planos bisectores entre distancias a vecinos y contando cuantos planos atravesamos para llegar a un punto: aquellos que necesitan atravesar n planos están en la zona 'n-ésima' de Brillouin.



1ZB
 2ZB
 3ZB
 Todas las zonas tienen el mismo área.

Potencial Periódico Débil

$$\psi_k(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}} c_{\vec{R}-\vec{k}} \cdot e^{i(\vec{k}-\vec{R}) \cdot \vec{r}} \quad [1]$$

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k}-\vec{R})^2 - E \right] c_{\vec{R}-\vec{k}} + \sum_{\vec{R}'} U_{\vec{R}'-\vec{R}} \cdot c_{\vec{R}-\vec{k}'} = 0 \quad [2]$$

Para \vec{k} fijo hay una ecuación [2] para cada $\vec{R} \Rightarrow$ Cada una de ellas es una banda 'n'

Supongamos dos niveles degenerados \Rightarrow con electrón libre

$$\begin{aligned} [E_{\vec{R}-\vec{k}_1} - E] c_{\vec{R}-\vec{k}_1} &= 0 & E_{\vec{R}-\vec{k}_1} &= E_{\vec{R}-\vec{k}_2} \\ [E_{\vec{R}-\vec{k}_2} - E] c_{\vec{R}-\vec{k}_2} &= 0 & \text{con } c_{\vec{R}-\vec{k}_i} &= 0 \text{ si } i \neq 1,2 \end{aligned}$$

Ahora metemos U débil \Rightarrow

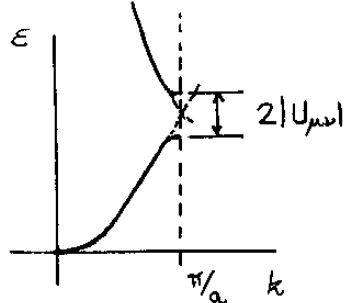
$$\begin{aligned} [E_{\vec{R}-\vec{k}_1} - E] c_{\vec{R}-\vec{k}_1} + U_{\vec{k}_2-\vec{k}_1} \cdot c_{\vec{R}-\vec{k}_2} &= 0 \\ [E_{\vec{R}-\vec{k}_2} - E] c_{\vec{R}-\vec{k}_2} + U_{\vec{k}_1-\vec{k}_2} \cdot c_{\vec{R}-\vec{k}_1} &= 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \vec{k}-\vec{k}_1 &\equiv \mu & \vec{k}_1-\vec{k}_2 &= \nu\mu & E_\mu &= E_\nu & U_{\mu\nu} &= U_{\nu\mu} \\ \vec{k}-\vec{k}_2 &\equiv \nu & & & & & U_{\vec{R}-\vec{R}} &= U_{00} \equiv 0 \end{aligned}$$

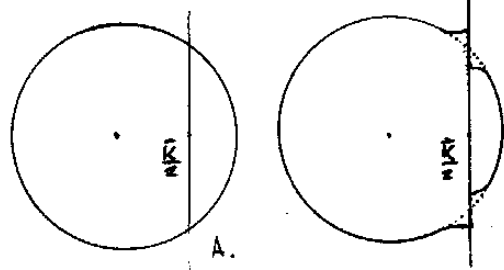
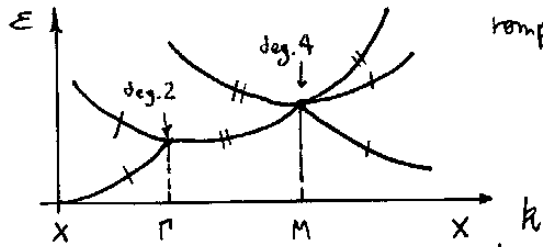
$$\begin{aligned} [E_\mu - E] c_\mu + U_{\mu\nu} \cdot c_\nu &= 0 \\ [E_\nu - E] c_\nu + U_{\nu\mu} \cdot c_\mu &= 0 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow E = E_\mu \pm |U_{\mu\nu}|$$

EL potencial periódico débil $U(\vec{r})$ genera un gap que rompe la degeneración cerca de los planos de Bragg



En general, en un borde de zona (plano de Bragg), con degeneración de orden 'm' resolveré un sistema de $m \times m$. En 2D, por ejemplo, en la 1ZI puede darse el caso de tener varios puntos con degeneración de diverso orden. En los casos vistos la degeneración se rompe de a dos.



La superficie de Fermi cerca del plano de Bragg se deforma \Rightarrow El $U(\vec{r})$ hace que ingrese normal en el borde de celda.
A. Electrón libre

TRIFAMOXIBL DUO
Amoxicilina + Sulbactam
Comprimidos x 14
Suspensión x 30 y 60 ml.

TRIFAMOX DUO
Amoxicilina
Comprimidos x 14
Suspensión x 50 y 90 ml.

TRIFAMOX DUO
Amoxicilina + Ambroxol
Comprimidos x 14
Suspensión x 50 ml

SEPTILISIN
Cefalexina Bago
Comprimidos x 16
Suspensión x 60 ml.
Suspensión x 90 ml.

SEPTICIDE
Ciprofloxacina Bago
Comprimidos x 10

VIXCEF
Comprimidos x 6
Suspensión x 30 y 60 ml.

UROSEPTAL
NORFLOXACINA
Comprimidos x 10 y 20

Pen Di Ben
Penicilina Benzatínica
Ampollas de 1.200.000 U.I. x 1
Ampollas de 2.400.000 U.I. x 1

Bago
A la vanguardia en antibioterapia
www.bago.com.ar

■ Aproximación de Uniones Fuertes [Tight Binding]

Trata el caso en que no podemos considerar a los átomos aislados, debido al overlap entre las funciones de onda electrónicas. Apropiado para aislantes ó para metales con capa 'd' semi-llena.

Pensamos el cristal como:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{at} + \Delta U(\vec{r}) \quad , \text{ donde } \mathcal{H}_{at} \phi_n = E_n \phi_n$$

Buscamos preservar la solución de Bloch

$$\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \overbrace{\phi_n(\vec{r}-\vec{R})}^{\text{satisface Bloch}} ; \quad \phi_n(\vec{r}) = \sum_j b_j \phi_j(\vec{r})$$

Como los $\phi_j(\vec{r})$ son orbitales atómicos localizados \Rightarrow este método no sirve para estados ionizados [NO SIRVE PARA DESCRIBIR NIVELES DE ELECTRÓN LIBRE]

Suponiendo un átomo por celda y un orbital tipo s por átomo

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \phi_s(\vec{r}-\vec{R})$$

$$E = \frac{\int \psi_{\vec{k}}^*(\vec{r}) \mathcal{H} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) d\vec{r}}{\int \psi_{\vec{k}}^*(\vec{r}) \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) d\vec{r}}$$

Definiendo:

$$\beta \equiv - \int d\vec{r} \Delta U |\phi_s(\vec{r})|^2 \quad \leftarrow \text{integrales de campo cristalino}$$

$$\gamma \equiv - \int d\vec{r} \phi_s^*(\vec{r}-\vec{R}) \Delta U(\vec{r}) \phi_s(\vec{r}) \quad \leftarrow \text{integrales de salto [hopping]}$$

$$S = \int d\vec{r} \phi_s^*(\vec{r}-\vec{R}) \phi_s(\vec{r}) \quad \leftarrow \text{overlap}$$

Los $\gamma \ll 0$ pues de lo contrario no vale la aproximación; lo mismo el S

$$E = E_0^s - \frac{\beta + \sum_{\vec{R} \neq 0} \gamma(\vec{R}) e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}}}{1 + \sum_{\vec{R} \neq 0} S(\vec{R}) e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}}}$$

Tight Binding usa $S \approx 0$ y $\gamma \ll 1$

Diagrama de bandas $E(\vec{k})$ del sólido

$$E = E_0^s - \beta - \sum_{\vec{R} \neq 0} \gamma(\vec{R}) e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}}$$

En una subsecuente aproximación: $\sum_{\text{lejos vecinos}}$, dado que $\gamma(\vec{R})$ se hace muy chica más allá de los primeros vecinos.

Generalizando para más de un átomo por celda, ó bien más de un orbital por celda.

$$[E_m^0 - E] b_m - \sum_n \beta_{mn} b_n - \sum_n \left[\sum_{\vec{R} \neq 0} \gamma_{mn}(\vec{R}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \right] b_n = 0$$

donde hemos considerado $S_{mn} = \int \phi_m^* \phi_n = 0$. Ahora:

← Ecuación maestra

$$\beta_{mn} \equiv - \int d\vec{r} \phi_m^*(\vec{r}) \Delta U(\vec{r}) \phi_n(\vec{r})$$

$$\gamma_{mn} \equiv - \int d\vec{r} \phi_m^*(\vec{r}-\vec{R}) \Delta U(\vec{r}) \phi_n(\vec{r})$$

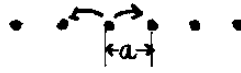
Tenemos una ecuación 'm' por cada tipo de átomo y las \sum_n corren por todos los tipos de átomos

- en la celda primitiva ($\vec{R}=0$) ($\rightarrow \beta_{mn}$)
- en otras celdas ($\vec{R} \neq 0$) ($\rightarrow \gamma_{mn}$)

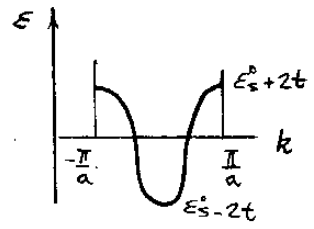
La consideración del caso que combina más de un átomo por celda y más de un orbital necesita un subíndice 'l' extra en la ecuación maestra.

• Ejemplo

Red 1D 1 átomo por celda, interacción t a primeros vecinos.



$$\epsilon = \epsilon_s - 2t \cos(ka)$$



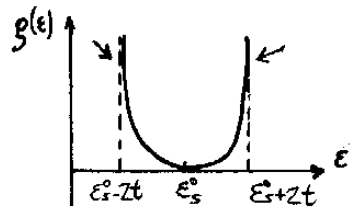
$$\frac{d\epsilon}{dk} = 2t \cdot \text{sen}(ka) \cdot a$$

$$\frac{\epsilon - \epsilon_s}{2t} = -\cos(ka)$$

$$\frac{(\epsilon - \epsilon_s)^2}{4t^2} = \cos^2(ka) = 1 - \text{sen}^2(ka)$$

$$\text{sen}(ka) = \sqrt{1 - \frac{(\epsilon - \epsilon_s)^2}{4t^2}}$$

$$\frac{d\epsilon}{dk} = 2at \left[1 - \frac{(\epsilon - \epsilon_s)^2}{4t^2} \right]^{1/2}$$



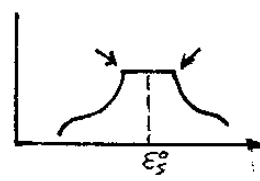
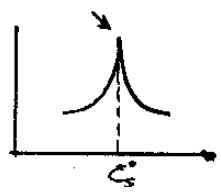
(*) Marca las singularidades de Van Hove

$$g(\epsilon) = \frac{dn}{d\epsilon} = \frac{dn}{dk} \cdot \frac{dk}{d\epsilon} \quad \text{En 1D } n = \frac{Zk}{\pi}$$

$$g(\epsilon) = \frac{Z}{\pi} \cdot \frac{1}{2at \left(1 - \frac{\Delta\epsilon^2}{4t^2} \right)^{1/2}}$$

g(epsilon) tiene singularidad en $\epsilon - \epsilon_s = \pm 2t$ del tipo esencial

En 2D se tienen discontinuidades logarítmicas y en el 3D tenemos discontinuidad de la derivada. Son otro tipo de singularidades de Van Hove.



Este comportamiento es consecuencia de la "irrealidad" de la interacción a primeros vecinos solamente.

TRIFAMOXIBL DUO
Amoxicilina + Sulbactam

Comprimidos x 14
Suspensión x 30 y 60 ml.

TRIFAMOX DUO
Amoxicilina

Comprimidos x 14
Suspensión x 50 y 90 ml.

TRIFAMOX DUO
Amoxicilina + Ambroxol

Comprimidos x 14
Suspensión x 50 ml

SEPTILISIN
Cefalexina Bago

Comprimidos x 16
Suspensión x 60 ml.
Suspensión x 90 ml.

SEPTICIDE
Ciprofloxacina Bago

Comprimidos x 10

VIXCEF

Comprimidos x 6
Suspensión x 30 y 60 ml.

UROSEPTAL
NORFLOXACINA

Comprimidos x 10 y 20

Pen Di Ben
Penicilina Benzatinica

Ampollas de 1.200.000 U.I. x 1
Ampollas de 2.400.000 U.I. x 1

Bago
A la vanguardia en antibioterapia
www.bago.com.ar

■ Dinámica de electrones

El modelo semiclásico muestra la evolución de \vec{r}, \vec{k} para un electrón en presencia de campos externos. Está basado en el conocimiento de $E_n(\vec{k})$. Vinulamos propiedad de transporte con estructura de bandas.

$$\dot{\vec{p}} = \hbar \dot{\vec{k}} = -e \vec{E} \quad \text{donde } \vec{H} = 0 \quad (\text{no hay campos magnéticos})$$

$$\Rightarrow \hbar \vec{k} = -e \vec{E} t \quad (\text{campo } \vec{E} \text{ uniforme})$$

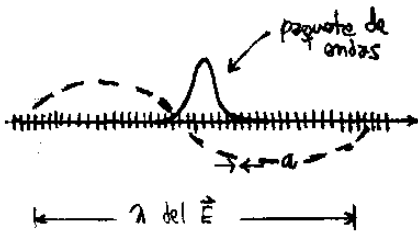
$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + e \vec{E} \cdot \vec{r} \right) \psi(\vec{r}, t) = i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t)$$

$$\text{con: } \vec{v} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_n(\vec{k})}{\partial \vec{k}}$$

$$\text{con } \psi(\vec{r}, t) = A \cdot e^{i \vec{k}(\vec{E}) \cdot \vec{r} - \frac{1}{\hbar} \int_0^t E(\vec{k}(t')) dt} \quad [1]$$

Asociamos a cada electrón: m, \vec{r}, \vec{k} .

Para que la aproximación valga \vec{E} debe variar lentamente en la extensión del paquete de ondas



La longitud sobre la que varía el campo \gg Extensión paquete de ondas
Extensión paquete de ondas \gg a

$$\psi = \sum_{\vec{k}} C(\vec{k}, t) \psi(\vec{k}, \vec{r})$$

[1] es un paquete de ondas de electrones libres, donde \vec{r}, \vec{k} son posición y momento del centro del paquete. Usamos teorema de Ehrenfest \Rightarrow Deben valer

$$\vec{v}_{\vec{k}} = \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_{\vec{k}} E_n(\vec{k}) \quad [2]$$

La \vec{v} de un electrón semiclásico es la $\vec{v}_{\vec{k}}$ del paquete de ondas asociado

$$\hbar \dot{\vec{k}} = \vec{F} \quad [3]$$

Las funciones de Bloch pueden escribirse como CL de funciones de Wannier

$$\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{N^{1/2}} \sum_{\vec{R}} e^{i \vec{k} \cdot \vec{R}} a_n(\vec{r} - \vec{R})$$

Las funciones de Wannier son transformaciones unitarias de las de Bloch. Usándolas vemos que valen [2] y [3].

Entonces:

$$\text{Conocer las bandas} \equiv \text{Tener la dinámica del electrón}$$

$$\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_n(\vec{k})}{\partial \vec{k}} \rightarrow \dot{\vec{v}} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial E_n(\vec{k})}{\partial \vec{k}} \right) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 E_n(\vec{k})}{\partial \vec{k}^2} \cdot \frac{\partial \vec{k}}{\partial t} = -\frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 E}{\partial \vec{k}^2} \left(\frac{e \vec{E}}{\hbar} \right) = \vec{a}$$

$$\Rightarrow \vec{F} = -e \vec{E} = m \vec{a}$$

$$\frac{1}{m} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E_n(\vec{k})}{\partial \vec{k}^2}$$

Las bandas renormalizan la masa del electrón

■ Superficie de Fermi y conductividad

$$\text{Suponemos } \vec{j} = \sigma \vec{E}$$

$$\hbar \frac{\delta \vec{k}}{\tau} = -e \vec{E}$$

La parte difusiva

$$\delta \vec{j} = -\frac{\delta V}{(2\pi)^3} 2 e \vec{v}_F$$

$\vec{j} = -ne\vec{v}$
donde \vec{v}_F = velocidad de los electrones que conducen

$$\delta V = \delta \vec{S} \cdot \delta \vec{k}$$

$$\delta \vec{j} = -\frac{1}{4\pi^3} \delta \vec{S}_F \cdot \delta \vec{k} e \vec{v}_F = \frac{e^2 \tau}{4\pi^3 \hbar} (\delta \vec{S}_F \cdot \vec{E}) \vec{v}_F = \frac{e^2 \tau}{4\pi^3 \hbar} \delta \vec{S}_F (\vec{v}_F \cdot \vec{E})$$

\Rightarrow Con las bandas puedo hallar el σ (tensor de conductividad)

■ Observaciones modelo Semiclasico

Hemos considerado $U(\vec{r})$ pequeño como para no dar lugar a saltos interbanda; $\lambda[U(\vec{r})] \gg$ spread paquete de ondas.

Que valga Ehrenfest significa que los paquetes de ondas siguen las trayectorias de partículas obedeciendo un \mathcal{H} clásico.

Metiendo las propuestas en las ecuaciones de Hamilton:

$$\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} E_n(\vec{k})$$

$$\hbar \dot{\vec{k}} = -e \left(\vec{E} + \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{B} \right)$$

Los dos resultados más importantes

En el límite de $U(\vec{r})=0$ el electrón es libre y en un \vec{E} uniforme adquiere una \mathcal{E} infinita a costa de la energía electrostática \Rightarrow el modelo no sirve. Por ello el modelo semiclásico prohíbe las transiciones interbanda.

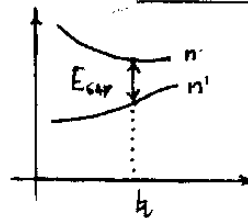
También se requiere a los campos que cumplan:

$$eEa \ll \frac{[E_{GAP}(\vec{k})]^2}{E_F} \quad (1)$$

$$\hbar \omega_c \ll \frac{[E_{GAP}(\vec{k})]^2}{E_F} \quad (2)$$

frec. ciclotrón \rightarrow

donde $E_{GAP}(\vec{k}) \equiv E_n - E_{n'}$



(1) se cumple en metales en la generalidad de los casos



Comprimidos x 14
Suspensión x 30 y 60 ml.



Comprimidos x 14
Suspensión x 50 y 90 ml.



Comprimidos x 14
Suspensión x 50 ml



Comprimidos x 16
Suspensión x 60 ml.
Suspensión x 90 ml.



Comprimidos x 10



Comprimidos x 6
Suspensión x 30 y 60 ml.



Comprimidos x 10 y 20



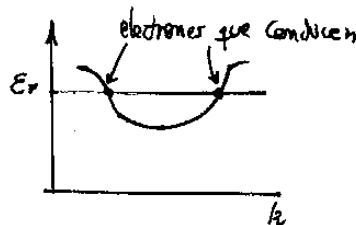
Ampollas de 1.200.000 U.I. x 1
Ampollas de 2.400.000 U.I. x 1



A la vanguardia en antibioticoterapia
www.bago.com.ar

■ Consecuencias dinámica del electrón

Las bandas llenas son inertes. La conducción se debe a aquellos electrones en bandas semillenas



$$\vec{j} = -e \int_{\vec{k} \in 1ZB} \frac{d\vec{k}}{4\pi^2} \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_n}{\partial \vec{k}} = 0$$

Por ser ∇ de E_n periódica en la 1ZB

de banda llena

Movimiento semiclásico en un campo DC. Tenemos respuesta alterna: oscilaciones de Bloch

$$\hbar \dot{\vec{k}} = -e\vec{E} \rightarrow \vec{k} = \vec{k}(0) - \frac{e\vec{E}t}{\hbar} \rightarrow \text{si } \vec{E} \parallel \vec{k} \Rightarrow$$

$v(\vec{k}) \propto \nabla_{\vec{k}} E_n(\vec{k})$ y $v(\vec{k})$ está acotada por ser periódica en \vec{k}

Agujeros. Podemos expresar:

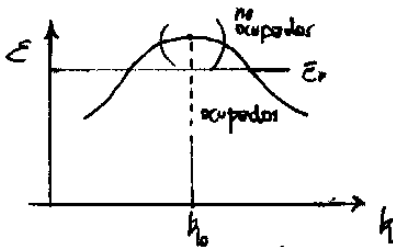
$$\vec{j} = \int_{1ZB} (-e) \frac{d\vec{k}}{4\pi^2} \vec{v}_k(\vec{k}) = 0 = \int_{\text{ocup.}} (-e) + \int_{\text{k desoc.}} (+e) \Rightarrow$$

$$\vec{j} = (+e) \int_{\text{desocup.}} \frac{d\vec{k}}{4\pi^2} \vec{v}_k(\vec{k})$$

Lo \vec{j} de $(-e)$ es como un \vec{j} de $(+e)$ que utiliza los niveles desocupados de la banda en lugar de los ocupados.

Evolución. Si surge de $\vec{k} = (e)(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B})$

$\vec{a} \parallel \vec{k} \rightarrow$ el electrón evoluciona como una part. de carga (-)
 $\vec{a} \perp \vec{k} \rightarrow$ el electrón evoluciona como una part. de carga (+)
 = opuesta. Esto último sucede para niveles como el del gráfico:



Entorno $\approx \vec{k}_0$ es $E(\vec{k}) \approx E(\vec{k}_0) - \frac{\hbar^2}{2m^*} (\vec{k} - \vec{k}_0)^2$ $m^* > 0$

$\vec{k} \in$ nivel no ocupado

$$\vec{v} \approx \frac{1}{\hbar} \left(\frac{\partial E}{\partial \vec{k}} \right) (\vec{k} - \vec{k}_0) = -\frac{\hbar (\vec{k} - \vec{k}_0)}{m^*}$$

$$\vec{a} = -\frac{\hbar \dot{\vec{k}}}{m^*} \Rightarrow \text{el electrón evoluciona como una part. de carga (+)}$$

Entonces el electrón cerca de k_0 puede pensarse como electrón (carga -e) con masa efectiva ($-m^*$); o bien como partícula de carga +e con masa $m^* > 0$.

Por otra parte los holes los pensamos como de masa* positiva responsables de la banda por sobre E_0 (resultan de carga +e)

Así surge el concepto del tensor de masa efectiva:

$$[M^{-1}(\vec{k})]_{ij} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial k_i \partial k_j}$$

\vec{k} cerca de un mínimo (electrones)
 \vec{k} cerca de un máximo (holes)

que determinará la dinámica de los holes cerca de los máximos de banda.

Esto da cuenta de los signos en R_{ii} pues:

(electrones) $\rightarrow R_{ii} = -\frac{1}{m_{eff} c}$ $R_{ii} = \frac{1}{m_{eff} c}$ (holes)

Podemos pensar en: $R_{ii}^{eff} = -\frac{1}{m_{eff} c}$

Con sólo \vec{B} presente la dinámica pasa a ser:

$$\vec{v}(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_n(\vec{k})}{\partial \vec{k}}$$

$$\hbar \dot{\vec{k}} = -\frac{e}{c} \vec{v} \times \vec{B}$$

$$\frac{\hbar c}{eB} \frac{d\vec{k}}{dt} = \vec{v}$$

Hay un recalcamiento de la velocidad

Semiconductores

El carácter de SC o aislante lo define el ancho del gap.

- $T=0$ aislante = SC
- $T \neq 0$ es SC si: $E_g \lesssim 2eV$

A medida que aumenta T saltan electrones de la BV a BC

$$k_B T_{amb} = 0,025 \text{ eV}$$

Un SC es un sólido aislante a $T=0$, tal que a $T \neq 0$ tiene conducción apreciable.

En un SC a medida que sube T baja ρ ; al contrario que en los conductores donde sube T y aumenta ρ

Con la subida de T se excitan más electrones a conducción, pese a que aumentan las colisiones y disminuye τ

$$\sigma_D = \frac{n e^2 T}{m^*} \rightarrow \rho_D = \frac{m^*}{n e^2 T} \rightarrow \frac{1}{\rho_D} \text{ (Drude no puede explicar SC)}$$

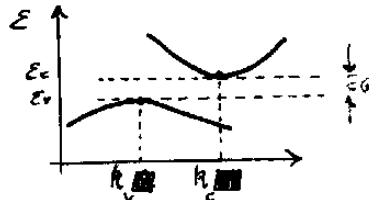
- SC intrínsecos: propiedades electrónicas determinadas por electrones de $BV \rightarrow BC$.
- SC extrínsecos: propiedades electrónicas determinadas por electrones de las impurezas (dopados)

Los elementos SC pertenecen a la col IV. Los E_g , a T_{amb} , son:

Si	1,12 eV	(estructura diamante)
Ge	0,67 eV	
C	6 eV	
Sn	Tiene alguna fase de diamante	
Pb	Ya es un metal	

Hay sustancias compuestas SC formadas por elementos de las columnas III-V y II-VI (cincblenda).

Si, Ge tienen gap indirecto, que significa tener el gap componente debido a los fonones [la parte horizontal].



Consideraremos hollarse cerca del Gap para tener $E_{libre}(E)$. En realidad:

$$E(\vec{k}) = E_c + \frac{\hbar^2}{2} \sum_{\mu\nu} k_{\mu} (M^{-1})_{\mu\nu} k_{\nu}$$

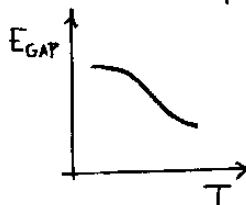
electrones
holes

, pero M se puede diagonalizar. Nos quedaremos con

$$E = E_c + \frac{\hbar^2}{2m} |\vec{k}|^2$$

ELECTR. HOLES

Gap directo \rightarrow transición: fotón
Gap indirecto \rightarrow transición: fotón + fonón



AL aumentar T se achica el gap



Comprimidos x 14
Suspensión x 30 y 60 ml.



Comprimidos x 14
Suspensión x 50 y 90 ml.



Comprimidos x 14
Suspensión x 50 ml



Comprimidos x 16
Suspensión x 60 ml.
Suspensión x 90 ml.



Comprimidos x 10



Comprimidos x 6
Suspensión x 30 y 60 ml.



Comprimidos x 10 y 20

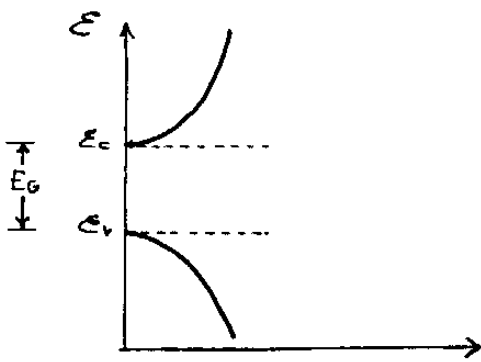
La excitación se hace con radiación EM



Ampollas de 1.200.000 U.I. x 1
Ampollas de 2.400.000 U.I. x 1



A la vanguardia en antibioticoterapia
www.bago.com.ar



$n_c \equiv$ densidad de electrones en BC, $g_c(E)$ densidad de estados [e-libre]
 $p_v \equiv$ densidad de huecos en BV, $g_v(E)$ [e-libre]

$$\frac{N^{e^-}}{V} = \int_{-\infty}^{E_v} g_v(E) \cdot dE = \int_{-\infty}^{E_v} g_v(E) \cdot f_{FD}(E) + \int_{E_c}^{+\infty} g_c(E) \cdot f_{FD}(E)$$

(T=0) (T≠0)

Estamos suponiendo que la EGAP no depende de T

$$n_c = \int_{E_c}^{+\infty} g_c(E) \cdot f_{FD}(E) \cdot dE$$

$$p_v = \int_{-\infty}^{E_v} g_v(E) \cdot [1 - f_{FD}(E)] \cdot dE$$

obs.
 La aprox. de No-DEGEN. hace que me halle mejor de los bordes con el Ef ⇒ Ley de acción de masas

Podemos hacer una aproximación

Cuando $k_B T \ll E_G = E_c - E_v$ [SC no degenerado] A TAMB vale pues $\left\{ \begin{array}{l} k_B T_{AMB} \ll E_G (sc) \\ 0,025 eV \ll 1 eV \end{array} \right.$
 En este caso: $f_{FD} \rightarrow f_{MB}(E) = e^{-\beta(E-\mu)}$

Evaluando:

$$\left. \begin{array}{l} n_c(T) = N_c(T) \cdot e^{-(E_c - \mu)/k_B T} \\ p_v(T) = P_v(T) \cdot e^{-(\mu - E_v)/k_B T} \end{array} \right\} \Rightarrow n_c \cdot p_v = N_c \cdot P_v \cdot e^{-\frac{\beta E_G}{2}}$$

$N_c, P_v = \frac{1}{4} \left(\frac{2m^* k_B T}{\pi h^2} \right)^{3/2}$

▲ Ley de Acción de Masas (no depende de μ)

• En el caso SC intrínseca: Las impurezas no contribuyen

$$n_c(T) \cdot p_v(T) \equiv n_i^2(T) \quad \leftarrow \quad n_c(T) = p_v(T) \equiv n_i(T)$$

Las electrones que conducen sólo pueden provenir de los huecos. En este caso es fácil evaluar $\mu_i(T)$ como:

$$\mu_i = E_v + \frac{E_G}{2} + \frac{1}{2} k_B T \cdot \ln \left(\frac{P_v}{N_c} \right)$$

$\mu \downarrow$ $N_c > P_v$ $m_c^* > m_v^*$ $\mu \uparrow$ $P_v > N_c$

Con T=0 $\mu(0) = E_f = E_v + \frac{E_G}{2}$ (se halla en el 1/2 del GAP) y como $\ln \sim 1 \Rightarrow \mu(T)$ vive lejos de los bordes², para T≠0.

SC no degenerado satisfacen casi todos los SC a TAMB.

• En el caso SC extrínseca: las impurezas contribuyen

$$\begin{array}{l} n_c - p_v = \Delta n \\ n_c \cdot p_v = n_i^2 \end{array} \quad \rightarrow \quad n_c(T) \neq p_v(T)$$

$$\frac{\Delta n}{n_i} = 2 \sinh \left(\frac{\mu - \mu_i}{k_B T} \right)$$

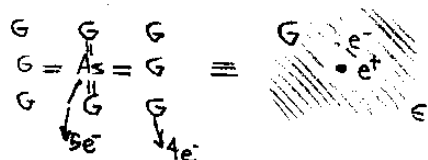
← La extrínseca se halla en el μ

Cuando $\left| \frac{\Delta n}{n_i} \right| \gg 1$ un tipo de portadores será dominante:

SC tipo 'n' → electrones
 SC tipo 'p' → huecos

Modelos de Impurezas

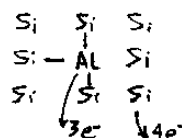
donoras: dan electrones a la BC



El bind es débil porque el sist. (e⁻, e⁺) está sumergido en un "fondo" del SC puro.

$N_D \equiv$ densidad de centros e⁻ (donores) en la muestra

aceptoras: capturan electrones de BV (dan huecos)



En realidad es la ausencia de partícula.

Esto es la picture correcta [Queda un electrón con gran AE de tomar otro electrón para formar la unión.]

$N_A \equiv$ densidad de centros e⁻ (aceptores) en la muestra

Podemos hacer una extrapolación

Radio de Bohr $a_0 = \frac{\hbar^2}{m e^2}$

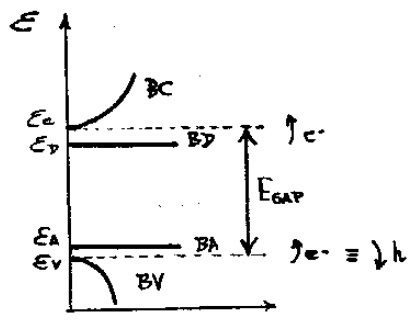
Energía de excitación del átomo de H $R_y = -\frac{e^4 m}{2 \hbar^2}$

si $m \rightarrow m^* \Rightarrow$

$$\left[\begin{aligned} a_0^* &= \frac{\epsilon \hbar^2}{m^* e^2} = \left(\frac{m}{m^*}\right) a_0 \\ R_y^* &= -\frac{e^4 m^*}{2 \hbar^2 \epsilon^2} = R_y \left(\frac{m^*}{m \epsilon^2}\right) \end{aligned} \right.$$

Como en general $m^* \gg m \Rightarrow a_0^* \approx 60-200 a_0$

$R_y^* \approx 1/50 R_y$



La energía de Ligadura de una impureza es pequeña comparada al GAP

$E_c - E_D \ll E_g$

$\sim 0,05 \text{ eV} \sim 1 \text{ eV}$

Ante $\Delta T=0$ lo más favorable es que las impurezas manden e^- a BC y h^+ a BV.

Población de Impurezas

Despreciando interacción electrones de diferentes impurezas

$$\langle n_d \rangle = \frac{\sum_j N_j e^{-\beta(E_j - \mu N_j)}}{\sum_j e^{-\beta(E_j - \mu N_j)}}$$

$N_j = 0, 1\uparrow, 1\downarrow$

$E_j = 0, E_D, E_A$

↑
se ionizó el electrón

$$\langle n_d \rangle = \frac{1}{\frac{1}{2} e^{\beta(E_D - \mu)} + 1}$$

$n_d = \langle n_d \rangle N_d$

En forma idem se llega a:

$$\langle p_a \rangle = \frac{1}{\frac{1}{2} e^{\beta(\mu - E_A)} + 1}$$

$N_j = 1\uparrow, 1\downarrow, 2\uparrow\downarrow$

$E_j = E_A, E_A, 2E_A$

↑ ↑ ↑

$p_a = \langle p_a \rangle N_a$

no llegaron un electrón desde fuera [se ionizó el hueco]

Aquí:

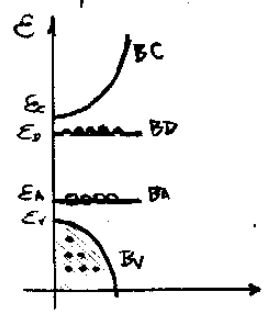
$n = \langle n \rangle N$

densidad de impurezas

medio de partículas por centros

densidad de centros

Equilibrio térmico



$n_c + n_d = N_d - N_a + p_v + p_a$

densidad electrónica en la BC

densidad electrónica en la BD

densidad de huecos en BV, BA

• a $T=0 \rightarrow n_d = N_d - N_a + p_a$

Puede ser que algún electrón en BD 'caiga' a BA.

• a $T \neq 0$ la excitación térmica ioniza impurezas $\left\{ \begin{aligned} e^- & \xrightarrow{BD} BC \\ h^+ & \xrightarrow{BA} BV \end{aligned} \right.$

• Excitación completa $\Rightarrow \left\{ \begin{aligned} N_d & \gg n_d \\ N_a & \gg p_a \end{aligned} \right.$

$\Delta n = n_c - p_v \cong N_d - N_a \Rightarrow$

$\frac{\Delta n}{n_i} = Z \sinh \left(\frac{\mu - \mu_i}{kT} \right)$



Comprimidos x 14
Suspensión x 30 y 60 ml.



Comprimidos x 14
Suspensión x 50 y 90 ml.



Comprimidos x 14
Suspensión x 50 ml



Comprimidos x 16
Suspensión x 60 ml.
Suspensión x 90 ml.



Comprimidos x 10



Comprimidos x 6
Suspensión x 30 y 60 ml.



Comprimidos x 10 y 20

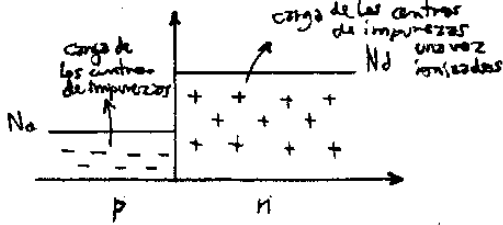


Ampollas de 1.200.000 U.I. x 1
Ampollas de 2.400.000 U.I. x 1



$\frac{\Delta n}{n_i} \gg 1 \rightarrow N_d - N_a \gg n_i \rightarrow$ comportamiento extrínseco $\rightarrow \begin{cases} N_d > N_a & \text{SC tipo n} \\ N_a < N_a & \text{SC tipo p} \end{cases}$
 $\frac{\Delta n}{n_i} \ll 1 \rightarrow N_d - N_a \ll n_i \rightarrow$ comportamiento intrínseco

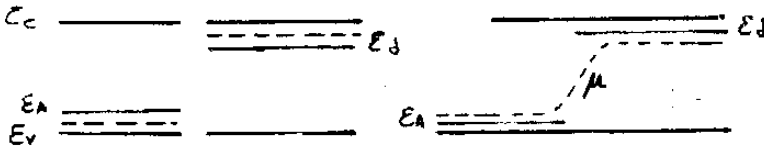
Junturas pn



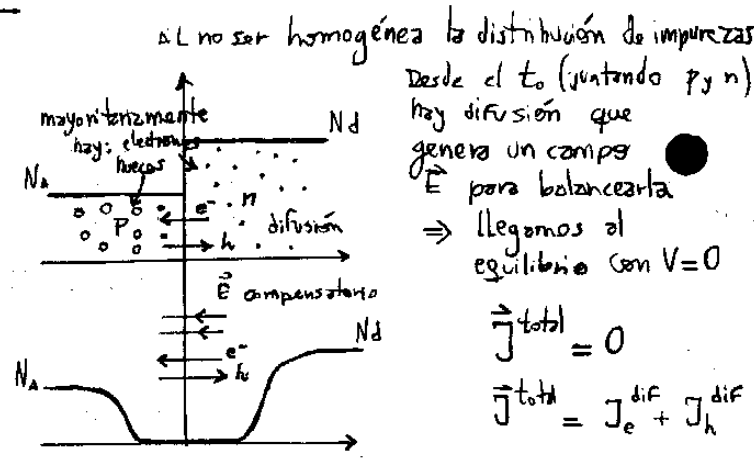
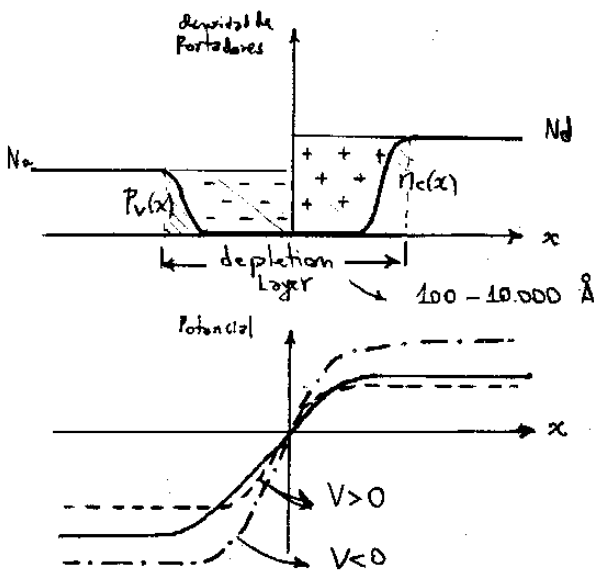
Juntura abrupta de SC diferentes. Junta en equilibrio considerando No-degeneración. Modelo semiclásico. Consideramos SC extrínseco en alto grado (conducción a cargo de impurezas). Lejos del depletion layer hay ionización total.

$$n_c - p_c \approx N_d - N_a$$

Resolvemos Poisson con los valores de las densidades. $V(x)$ es suave



La caída de potencial es principalmente en el d.l. por la gran resistencia eléctrica



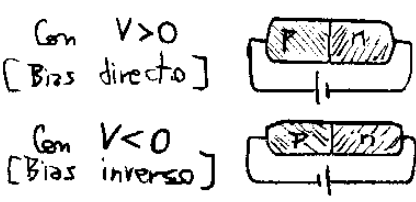
AL no ser homogénea la distribución de impurezas Desde el t_0 (juntando p y n) hay difusión que genera un campo E para balancearla \Rightarrow llegamos al equilibrio con $V=0$

$$\vec{j}_{total} = 0$$

$$\vec{j}_{total} = \vec{j}_e^{dif} + \vec{j}_h^{dif}$$

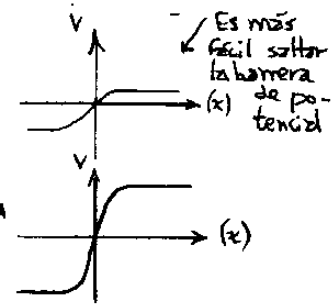
Aplicamos un $V \Rightarrow$ se rompe el balance Se generan corrientes

holes	electrones	NOTAS
$J_h^{gen} (n \rightarrow p)$ $V < 0$	$J_e^{gen} (p \rightarrow n)$ $V < 0$	son independientes del potencial con los supuestos usados con portadores minoritarios pero con campo $E \neq$ favor
$J_h^{dif} (p \rightarrow n)$	$J_e^{dif} (n \rightarrow p)$	sensibles al V con mayor nº de portadores pero con campo E en contra

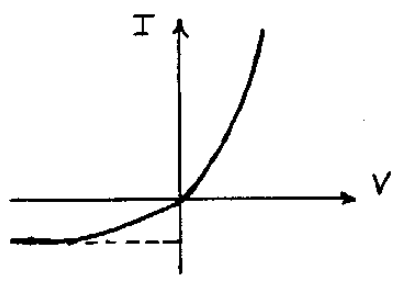


$$J_h = J_h^{gen} (e^{eV/k_B T} - 1)$$

$$J_e = J_e^{gen} (e^{-eV/k_B T} - 1)$$



Para electrones las corrientes son inversas, pero dada que la carga es negativa se invierte y entonces



$$J^{total} = e (J_h^{gen} + J_e^{gen}) (e^{eV/k_B T} - 1)$$

← Esto es una situación fuera del equilibrio desde no vale "ley de acción de masas".

Energía de Cohesión

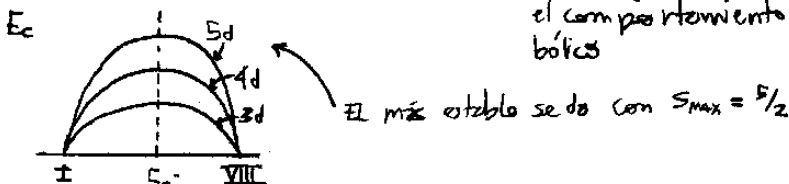
El EM es el responsable de la cohesión del átomo. Un átomo no colapsa ni se desliga por la lucha exclusión-electrostática. Se define:

$$E_{\text{cohesión}} = - (E_{\text{cristal}} - E_{\text{átomo libre}})$$

Wago $E_c > 0$ estable gas noble ~ 0.01 eV/átomo
 $E_c < 0$ inestable metal ~ 1 eV/átomo

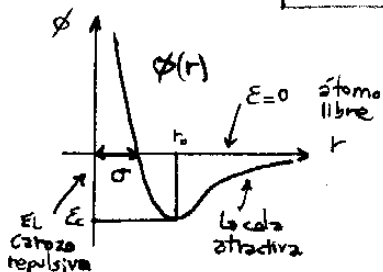
	I	II	III	IV	V	...	VIII
$\frac{eV}{\text{átomo}}$	1.6	3.3	5	7	5	...	0.02
	0.8	1.9	2	2.3	2.1	...	0.16

- A medida que aumenta el # de electrones total disminuye la cohesión por el intercambio y la correlación (que son menores).
- A lo largo de una subcapa el comportamiento es parabólico



Los sólidos formados por gases nobles (a baja T) no modifican su estructura electrónica en el cambio y son inestables pues tienden a volatilizarse. Son los cristales moleculares: la interacción que los une es la dipolar y la que impide su colapso la repulsión core-core. Esto se modela con un potencial Lennard-Jones de pares:

$$\phi_{ij} = \frac{B}{r_{ij}^{12}} - \frac{A}{r_{ij}^6}$$



La fuerza resultante es la fuerza de Van Der Waals. Lennard-Jones es un potencial de primeros vecinos pues es de muy corto alcance: NO SIRVE PARA METALES.

Se lo modela de la forma

$$\phi_{ij}(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right]$$

$\epsilon \sim 0.01$ eV
 $\sigma \sim 3-4$

Evaluó la energía por átomo sumando con todos los vecinos

$$U = \frac{U}{N} = \frac{1}{Z} \sum_{\vec{R} \neq 0} \phi(\vec{R}) \quad \text{con } \vec{R} \in \text{red de Bravais}$$

La distancia a cualquier átomo lo pongo en términos de la r_{nn}

$r_{ij} = \alpha(\vec{R}) r_{nn} \rightarrow$ La energía por átomo será:

$$u = 2\epsilon \left[A_{12} \left(\frac{\sigma}{r_{nn}} \right)^{12} - A_6 \left(\frac{\sigma}{r_{nn}} \right)^6 \right]$$

$$A_n = \sum_{\vec{R} \neq 0} \left(\frac{1}{\alpha(\vec{R})} \right)^n \quad A_6 = \# \text{ 1eros vecinos}$$

$$A_n = \# \text{ 1eros vec. } 1 + \# \text{ 2dos vec. } \frac{1}{d_{2v}} + \dots + \# n \text{ vec. } \frac{1}{d_{nv}}$$

Separación de 'nn' de equilibrio [minimiza u]

$$r_{nn}^0 = \sigma \cdot \left(\frac{Z A_{12}}{A_6} \right)^{1/6}$$

$$u(r_{nn}^0) \equiv E_c$$

$$\rightarrow u(r_{nn}^0) = -8.6 \epsilon$$



Comprimidos x 14
 Suspensión x 30 y 60 ml.



Comprimidos x 14
 Suspensión x 50 y 90 ml.



Comprimidos x 14
 Suspensión x 50 ml



Comprimidos x 16
 Suspensión x 60 ml.
 Suspensión x 90 ml.



Comprimidos x 10



Comprimidos x 6
 Suspensión x 30 y 60 ml.



Comprimidos x 10 y 20



Ampollas de 1.200.000 U.I. x 1
 Ampollas de 2.400.000 U.I. x 1



A la vanguardia en antibioterapia
 www.bago.com.ar

Se puede calcular el módulo de Bulk desde

$$B = -V \cdot \frac{\partial P}{\partial V} \Big|_T = v \frac{\partial^2 U}{\partial v^2} \rightarrow$$

$$B_0 = \frac{75E}{\sigma^3}$$

■ Cristales Iónicos

Siempre pensamos que la E_c es dada por la $U_{pot.}$ de partículas clásicas localizadas en sus posiciones de equilibrio. Para sustancias iónicas las partículas son iones cargados y la parte atractiva es ahora $\phi_{Coulomb}$, que tiene mucho mayor alcance.

$$U(r_{nn}) = U_{Gre}(r_{nn}) + U_{Coulomb}(r_{nn})$$

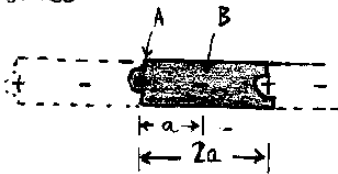
Tendremos iones de varios tipos: El potencial de Coulomb lucirá:

$$U_{Coulomb}(r_{nn}) = -\frac{e^2}{r_{nn}} \left\{ \frac{1}{\alpha(\vec{d})} + \sum_{\vec{R} \neq 0} \left(\frac{1}{\alpha(\vec{R}+\vec{d})} - \frac{1}{\alpha(\vec{R})} \right) \right\} = -\alpha_M \frac{e^2}{r_{nn}}$$

$|\vec{R}| = \alpha(\vec{R}) r_{nn}$ iones del tipo A
 $|\vec{R}+\vec{d}| = \alpha(\vec{R}+\vec{d}) r_{nn}$ iones del tipo B
iones B en la celda actual otras celdas todos los iones del tipo A todos los iones B

α_M es la constante de Madelung. $E_c(Na^+Cl^-) = 7.9 eV$

• Ejemplo Red 1D iónica



$$-\frac{e^2}{a} \left\{ 1 + \left(\frac{1}{3} + \frac{1}{5} + \frac{1}{7} + \dots + \frac{1}{1} + \frac{1}{3} + \frac{1}{5} + \frac{1}{7} + \dots - \frac{1}{2} - \frac{1}{2} - \frac{1}{4} - \frac{1}{4} - \dots \right) \right\}$$

$$\left\{ 1 + \left(1 + 2 \left[\frac{1}{3} + \frac{1}{5} + \dots \right] - 2 \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{4} + \dots \right] \right) \right\}$$

$$2 \left\{ 1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} + \frac{1}{5} - \dots \right\}$$

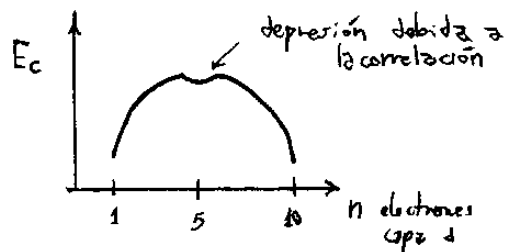
$$U_{Coulomb} = -\frac{e^2}{a} 2 \cdot \ln(2)$$

• Cohesión referente al llenado

La energía de cohesión en la capa 'd' sigue un esquema que deviene en el gráfico siguiente.

Con $l=Z$ (capa 'd') es

	2	1	0	-1	-2	
se llenan de a uno	↑	↑	↑	↑	↑	ascenso ↗
	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	descenso ↘



AL ir disminuyendo el intercambio baja la E_c .
EL intercambio hace mas estable al sistema

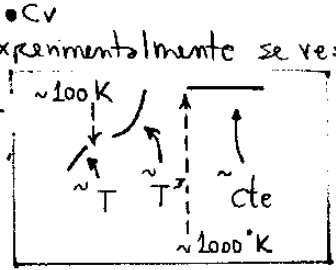
Fallor del Modelo de red estática

Hay cosas que siguen fallando, pese a que hemos abandonado el electrón libre. Se debe a que despreciamos los grados de libertad de la red.



Comprimidos x 14
Suspensión x 30 y 60 ml.

Experimentalmente



Sin embargo sólo obtuvimos $Cv \sim T$ (contribuciones electrónicas)

En aislantes $Cv \sim T^3$ ($\neq T \sim 0$) [no hay contrib. lineal con $T \sim 0$ de los electrones].



Comprimidos x 14
Suspensión x 50 y 90 ml.

• Vibraciones punto-0

Deben ser tenidas en cuenta para el cálculo de E_c

• Expansión térmica

Esto depende de las vibraciones de los iones

• Fusión de los sólidos

Con T muy alta los iones se disgregan. Hasta ahora la función de T era solo excitar electrones a través del gap.

• Ley de Wiedemann-Franz

A temperaturas intermedias falla. $\kappa/\sigma T$ depende de T . (debería ser cte.)

• Dependencia de T con T

Solo pueda explicarse: $\left\{ \begin{array}{l} \rho \propto T^5 \quad (T \sim 0) \\ \rho \propto T \quad (T \gg 1) \end{array} \right\}$ tomzndo en cuenta la



Comprimidos x 14
Suspensión x 50 ml

vibración de los iones.

• Superconductividad

Debajo de T_c la $\rho \rightarrow 0$ en ciertos metales. Es una consecuencia de la interacción fonones-electrones.

• Conducción térmica en aislantes

No hay mecanismo de conducción de calor disponible para aislantes; la red debe moverse.

• Transmisión de sonido

Los aislantes transmiten asimismo el sonido en forma de ondas vibracionales en la red de iones.

• Scattering de rayos X

No se condice con el experimento: las vibraciones térmicas disminuyen las picas. También es necesario corregir en el scattering de neutrones



Comprimidos x 16
Suspensión x 60 ml.
Suspensión x 90 ml.



Comprimidos x 10



Comprimidos x 6 y 10
Suspensión x 30 y 60 ml.

Dinámica de Redes: Planteo

Se usa una aproximación adiabática: Born-Oppenheimer

$$H = - \sum_i \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial U_i^2} - \sum_i \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r_i^2} + \sum_{\langle i,j \rangle} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + V(U, r) + G(U)$$

\uparrow inter. electrón-electrón \uparrow Pot. electrón-ión \uparrow inter. ión-ión

con $\Psi^S = \Psi(r, U) \phi(U)$ ← solución separable propuesta

Metiendo la solución se llega a:

$$-\Psi \left[- \sum_i \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial U_i^2} + G(U) + G(r) + V(U, r) \right] \phi - \left\{ \sum_i \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial \phi}{\partial U_i} \frac{\partial \Psi}{\partial U_i} \right)^2 + \sum_i \frac{\hbar^2}{2m} \phi \frac{\partial^2 \Psi}{\partial r_i^2} \right\} = E_0(\phi \Psi)$$

térn. adiabáticas

Usando que los electrones están fuertemente ligados y: $\Psi^S(\vec{U}_i, \vec{r}_i) = \Psi(\vec{r}_i, \vec{U}_e)$
[esto no va a funcionar bien para metales] se tiene:



Comprimidos x 10 y 20



Ampollas de 1.200.000 U.I. x 1
Ampollas de 2.400.000 U.I. x 1

A la vanguardia en antibioticoterapia

www.bago.com.ar

 Udec » Unúcleos

 A cada momento para los núcleos, los electrones se hallan en su ground state.

$\frac{\partial \Psi}{\partial U_e} = -\frac{\partial \Psi}{\partial U_r} \Rightarrow$ Los términos no adiabáticos se pueden escribir

$$-\sum_i \frac{\hbar^2}{M} \left(\frac{\partial \phi}{\partial u_i} \frac{\partial \Psi}{\partial r_i} \right) - \sum_i \frac{\hbar^2}{2m} \phi \frac{\partial^2 \Psi}{\partial u_i^2}$$

Examinando la contribución a la energía de estos términos

$$\int \Psi^* A d\mathbf{r} d\mathbf{u}, \quad \int \Psi^* B d\mathbf{r} d\mathbf{u}$$

veamos que puede despreciarse amparados en:

Además pensamos: # electrones \gg # núcleos

Resulta en el hamiltoniano nuclear:

• $\frac{m}{M}$ chico, • $\int \phi^* \phi d\mathbf{u}$ chico
 las núcleos son muchos más masivos
 # de núcleos

$$\mathcal{H}(\phi \Psi) = \mathcal{H} \Psi \Rightarrow \left\{ -\sum_i \frac{\hbar^2}{2M} [\nabla_i^2] + G(U_e) + \epsilon(\bar{u}_e) \right\} \phi(\bar{u}) = \epsilon_0 \phi(\bar{u})$$

La $\Psi(r, u)$ es la solución del problema electrónica que tiene a u como parámetro.

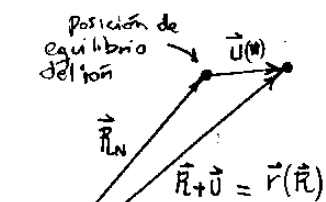
contribución adiabática de los electrones $G(r) + V(u, r)$

■ Dinámica de Redes: Solución Armónica

Suposiciones básicas

- En no-metales vale la aprox. adiabática
- En sistemas cristalinos vale el teorema de Bloch
- Los $\{\bar{R}_i\}$ son las posiciones de equilibrio de los iones
- Los iones vibran con baja amplitud respecto a sus posiciones de equilibrio

Usamos aproximación armónica del potencial (me paro en el equilibrio y me quedo a orden 2)



Pot. total: es N veces el de un átomo en $\bar{R}=0$

$$\bar{r}(\bar{R}_N) = \bar{R}_N + \bar{U}(N)$$

$$U = \frac{N}{2} \sum_{\bar{R} \neq 0} \phi(\bar{R}) = \frac{1}{2} \sum_{\bar{R}} \sum_{\bar{R}'} \phi(\bar{R} - \bar{R}') \leftarrow \text{con los átomos fijos}$$

$$U = \frac{1}{2} \sum_{\bar{R}} \sum_{\bar{R}'} \phi[\bar{r}(\bar{R}) - \bar{r}(\bar{R}')] \leftarrow \text{con los iones vibrando}$$

$$U^{arm.} = U_0 + \frac{1}{2} \sum_{nm} \sum_{lj} D_{ij}^{nm} u_i(n) u_j(m)$$

átomos en la base $\bar{D}_c(r, d) \times (r, d)$

Es un pot. de pequeñas oscilaciones cuadrático en las coordenadas

$$U^{arm.} = U_0 + \frac{1}{2} \sum_{nm} \bar{U}(n) \bar{D}_{nm} \bar{U}(m)$$

Hemos llegado a la matriz \bar{D}^{nm}

• Características

- $D_{ij}^{nm} = D_{ji}^{mn}$ derivadas cruzadas iguales
- Es función de la distancia entre sitios (por ser potencial de pares) $D_{ij}^{nm} \equiv D_{ij}^{(n-m)}$
- Simetría traslacional del potencial $\sum_n \bar{D}^{nm} = 0$
- Simetría de inversión en la red de Bravais $D_{ij}^{0n} = D_{ij}^{0-n}$

$$D_{ij}^{mn} \equiv \frac{\partial^2 U}{\partial r_i(n) \partial r_j(m)} \Big|_{u_i(n)=0, u_j(m)=0}$$

$$-D_{ij}^{nm} u_j(m) = \begin{cases} \text{contribución a la fuerza sobre la coordenada 'i' del átomo en } \bar{R}_n \\ \text{debida al átomo } \bar{R}_m \text{ según desplazamiento 'j' de éste último.} \end{cases}$$

Luego se plantean las ecuaciones de movimiento como:

$$M_i \ddot{\vec{U}}_i(n) = - \frac{\partial U^{Arm}}{\partial \vec{U}_i(n)}$$

Plantamos $U^{Arm} \Rightarrow$ Aplica Newton
 \Rightarrow obtengo ω de pequeñas oscilaciones $\Rightarrow \omega = \omega(k)$
 Relación de dispersión

$$M_i \ddot{\vec{U}}_i(n) = - \sum_m \overleftrightarrow{D}^{o n-m} \vec{U}_i(m)$$

Habrás una ecuación por cada tipo de átomo, que se spliteará en 'd' dimensiones. Tendré $N\vec{R}$ -vectors del sistema permitidos. Cada uno daría 3 m.n en 3D

$\vec{R} \rightarrow$ Longitudinal (asociado a \hat{k}); transversal (asociados a $\hat{k}' \perp \hat{k}$)

Busca soluciones en forma de ondas planas:

$$\vec{u}(n,t) = \vec{u}_0 e^{i(\vec{q} \cdot \vec{R}_n - \omega t)}$$

$$M\omega^2 \vec{u}_0 = \sum_m \overleftrightarrow{D}^{o n-m} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}_m} \vec{u}_0$$

$$M\omega^2 \vec{u}_0 = \overleftrightarrow{D}(\vec{q}) \vec{u}_0$$

$$[M\omega^2 \mathbb{I} - \overleftrightarrow{D}(\vec{q})] \vec{u}_0 = 0$$

donde:

$$\overleftrightarrow{D}(\vec{q}) = \sum_m \overleftrightarrow{D}(\vec{R}_m) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}_m}$$

es la matriz dinámica

NOTA

En la práctica los coeficientes $\overleftrightarrow{D}_{ij}^{on}$ se evalúan como:

$$D_{ij}^{on} = -\alpha^{on} \epsilon_i^{on} \epsilon_j^{on}$$

$\epsilon_k^{on} \equiv$ vector primitivo que une átomos $0+n$ en la coordenada cartesiana \vec{R}

Como vale inversión en red Bravais y simetría traslacional:

$$\overleftrightarrow{D}(\vec{R}) = \overleftrightarrow{D}(-\vec{R}) \quad \text{y} \quad \sum_{\vec{R}} \overleftrightarrow{D}(\vec{R}) = 0 \Rightarrow$$

$$\overleftrightarrow{D}(\vec{k}) = \frac{1}{2} \sum_m \overleftrightarrow{D}(\vec{R}_m) \cdot (e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_m} + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_m} - 2)$$

$$= \sum_m \overleftrightarrow{D}(\vec{R}_m) [\cos(\vec{k} \cdot \vec{R}_m) - 1]$$

$$\overleftrightarrow{D}(\vec{k}) = -2 \sum_m \overleftrightarrow{D}(\vec{R}_m) \cdot \sin^2\left(\frac{\vec{k} \cdot \vec{R}_m}{2}\right) \rightarrow \overleftrightarrow{D}(\vec{k}) \in \mathbb{R}$$

$\overleftrightarrow{D}(\vec{k})$ tiene autovalores reales y en 3D satisfacen [lineal algebra] ^{es simétrica}

$$\overleftrightarrow{D}(\vec{k}) \vec{u}_0 = \lambda_s \vec{u}_0 \quad \text{con} \quad \omega_s(\vec{k}) = \sqrt{\frac{\lambda_s}{M}}$$

con $|\vec{k}| \ll 1 \rightarrow$

$$\overleftrightarrow{D}(\vec{k}) = -\frac{k^2}{2} \sum_m \overleftrightarrow{D}(\vec{R}_m) (\hat{k} \cdot \vec{R}_m)^2 \Rightarrow \omega_s = c_s \cdot k$$

La $\omega(k)$ es lineal con $|\vec{k}| \ll 1$. Estos son los llamados modos acústicos.



Comprimidos x 14
Suspensión x 30 y 60 ml.



Comprimidos x 14
Suspensión x 50 y 90 ml.



Comprimidos x 14
Suspensión x 50 ml



Comprimidos x 16
Suspensión x 60 ml.
Suspensión x 90 ml.



Comprimidos x 10



Comprimidos x 6 y 10
Suspensión x 30 y 60 ml.



Comprimidos x 10 y 20



Ampollas de 1.200.000 U.I. x 1
Ampollas de 2.400.000 U.I. x 1



A la vanguardia en antibióticoterapia
www.bago.com.ar

$$\vec{k} = \frac{m_1 v_1}{M} + \frac{m_2 v_2}{M} + \frac{m_3 v_3}{M}$$

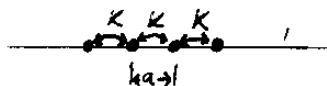
$$\frac{1}{M} (m_1 v_1 + m_2 v_2 + m_3 v_3)$$

Se plantea el $U^{arm.} = \frac{1}{2} \sum_{n,m} \frac{\partial^2 \phi}{\partial r_n \partial r_m} u_n u_m$

$$M \omega^2 = - \frac{\partial}{\partial (r_n)} U^{arm.} (u(r_n))$$

■ Caso 1D; 1 átomo en base

Cadena 1D interacción a 1^{er} vecinos (K).



$$U^{arm.} = \frac{1}{2} \sum_n K (U[na] - U[(n-1)a])^2$$

$$M \ddot{u}(na) = - \frac{\partial U^{arm.}}{\partial (na)} = -K \{ (U[na] - U[(n-1)a]) + (U[(n+1)a] - U[na]) \}$$

$$u = u_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{R} - \omega t)} \rightarrow \text{solución onda plana}$$

$$\ddot{u} = -\omega^2 u_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{R} - \omega t)}$$

$$M u_0 \omega^2 e^{ikna} = -K \{ u_0 (e^{ikna} - e^{ikna} e^{-ika}) + u_0 (e^{ikna} e^{ika} - e^{ikna}) \}$$

$$M u_0 \omega^2 = -u_0 K \{ e^{-ika} + e^{ika} + 2 \}$$

$$M \omega^2 = -2K [\cos(ka) - 1]$$

$$\omega^2 = 2 \left(\frac{K}{M} \right) 2 \cdot \text{sen}^2 \left(\frac{ka}{2} \right)$$

$$\boxed{\omega = 2 \sqrt{\frac{K}{M}} \cdot \text{sen} \left(\frac{ka}{2} \right)}$$

con $|k| \ll 1$ es: $\omega = 2 \sqrt{\frac{K}{M}} \left(\frac{ka}{2} \right)$

$$k=0 \Rightarrow \omega=0$$

$U(na) = U[(n+1)a] \rightarrow$ Todos los átomos en fase

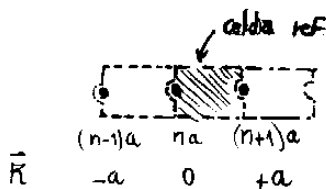
$$k = \frac{\pi}{a} \Rightarrow \omega = 2 \sqrt{\frac{K}{M}}$$

$U(na) = -U[(n+1)a] \rightarrow$ en contra fase

$$\vec{D}(\vec{k}) = \vec{D}^{00} e^{-ik \cdot 0} + \vec{D}^{01} e^{-ik \cdot (-a)} + \vec{D}^{10} e^{-ik \cdot a} = 2K \cdot 1 - K e^{ika} - K e^{-ika}$$

$$\vec{D}(\vec{k}) = -2K [\cos(ka) - 1]$$

$$\boxed{\vec{D}(\vec{k}) = 4K \cdot \frac{\text{sen}^2 \left(\frac{ka}{2} \right)}{2}}$$



$$\vec{D}^{00} + \vec{D}^{01} + \vec{D}^{10} = 0$$

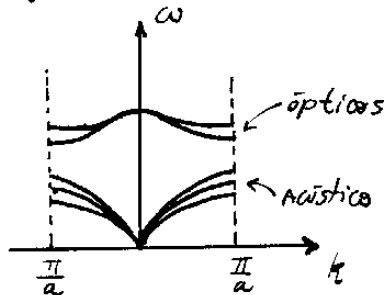
Tengo que incluir tentos \vec{D}^{0n} como vecinos 'n' interacción con el átomo '0'.

En 2D puede ser más fácil resolver directamente con la matriz dinámica.

Los modos acústicos serán aquellos tales que:

$$\omega_{acústico} \ll \omega_{óptica}$$

En general tendremos la situación de la figura.



Habrán 'd' ramas acústicas.

Tendrán "N.r.d" modos normales. Habrá 'd.r.-d' ramas ópticas.

Ramas acústicas → asociadas a mov. en fase de todas las celdas

Ramas ópticas → asociadas a vibraciones dentro de la celda.

Se puede generalizar el método de la matriz dinámica para llegar a:

$$M_{\mu\nu} \ddot{u}_\nu(n, \mu, t) = - \sum_m D_{ij}^{nm} u_j(m, \nu)$$



Comprimidos x 14
Suspensión x 30 y 60 ml.



Comprimidos x 14
Suspensión x 50 y 90 ml.



Comprimidos x 14
Suspensión x 50 ml



Comprimidos x 16
Suspensión x 60 ml.
Suspensión x 90 ml.



Comprimidos x 10



Comprimidos x 6 y 10
Suspensión x 30 y 60 ml.



Comprimidos x 10 y 20



Ampollas de 1.200.000 U.I. x 1
Ampollas de 2.400.000 U.I. x 1



A la vanguardia en antibioticoterapia
www.bago.com.ar

$$\left| M_{\mu}^{-1/2} M_{\nu}^{-1/2} D_{ij}^{\mu\nu}(\vec{q}) - \omega^2 \delta_{ij} \delta_{\mu\nu} \right| = 0$$

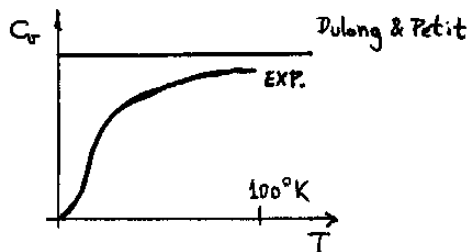
■ Calor Específico de un cristal: Ley de Dulong y Petit

$$\epsilon = \frac{1}{V} \frac{\int d\Gamma \cdot H e^{\beta H}}{\int d\Gamma e^{\beta H}} \rightarrow \epsilon = \epsilon_0 + 3nk_B T$$

$$C_v = \frac{\partial \epsilon}{\partial T} = 3nk_B \leftarrow \text{Ley de Dulong \& Petit}$$

Donde H es el hamiltoniano clásico en función de momentos y coordenadas

Dado que los iones se mueven evaluamos ϵ como el $\langle E \rangle / V$. Este es un cálculo clásico y obtenemos el valor constante $3nk_B$ que discrepa fuertemente del experimento a toda T.



Es el C_v debido a las vibraciones iónicas, y el C_v total para un aislante [que no tiene C_v electrónico]

Incluso con T grande es evidente que el valor $3nk_B$ no ajusta al experimental. Esto puede explicarse en parte como falta de la aproximación armónica [efecto de las anarmonicidades].

Sin embargo el comportamiento en T=0 requiere una teoría de la dinámica de la red basada en Q.M.

Clásicamente un sistema de N partículas en pequeñas oscilaciones es una CL de 3N m.n. con sus vs. Cuánticamente un oscilador tiene energías permitidas según:

$$\epsilon = \left(n + \frac{1}{2} \right) h\nu \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Para 3N osciladores (indeptes.) la energía será la suma de las ϵ individuales

Teoría Cuántica del cristal armónico

Tratando cuánticamente al cristal debemos reemplazar la integral en el espacio de fases Γ por la sumatoria de los estados estacionarios del cristal con energía E_i .

$$\epsilon = \frac{1}{V} \frac{\sum_i E_i e^{\beta E_i}}{\sum_i e^{\beta E_i}} \quad [1]$$

Consideramos al cristal como 'N.r.d' osciladores independientes con frecuencias dadas por los m.n. clásicos. Propiedades como solución C.L. del \mathcal{H} clásico (C.L. de ondas planas) termino con 'N.r.d' ecuaciones de oscilador armónico.

⇒ Tengo un gas de bosones (osc. arm. indeptes)

Entonces un m.n. particular contribuye a la energía con

$$E_{j\vec{q}} = \hbar \omega_j(\vec{q}) \left[n_j(\vec{q}) + \frac{1}{2} \right]$$

donde $n_j(\vec{q})$ es el # de excitación del modo normal. Luego

$$E_i = \sum_j \sum_{\vec{q}} \hbar \omega_j(\vec{q}) \left[n_j(\vec{q}) + \frac{1}{2} \right] \quad [2]$$

← Estado energético "i-ésimo" del cristal de N-iones

Energía de la "j-ésima"

$n_j(\vec{q})$ es el # de fonones: el cuanto de excitación del modo normal, o el modo mismo. Evaluando ϵ según [1] con E_i de [2] se ve que:

$$n_j(\vec{q}) = \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega_j(\vec{q})} - 1}$$

de excitación medio del m.n.; ó # de fonones presentes a dada T

$$E_i = \sum_{j\vec{q}} \left[\frac{1}{e^{\beta \hbar \omega_j(\vec{q})} - 1} + \frac{1}{2} \right] \hbar \omega_j(\vec{q})$$

$$E_i = \frac{1}{2} \sum_{j\vec{q}} \hbar \omega_j(\vec{q}) + \sum_{j\vec{q}} \left(\frac{\hbar \omega_j(\vec{q})}{e^{\beta \hbar \omega_j(\vec{q})} - 1} \right)$$

$$\epsilon = \frac{1}{V} \sum_{j\vec{q}} \frac{1}{2} \hbar \omega_j(\vec{q}) + \epsilon_0$$

Ahora tenemos a $T=0$ ϵ del punto cero (además de ϵ_0) debida a los iones

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial T} = C_V = \frac{1}{V} \sum_{j\vec{q}} \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{\hbar \omega_j(\vec{q})}{e^{\beta \hbar \omega_j(\vec{q})} - 1} \right)$$

Ahora se tendrán:

• Altas T → $\beta \hbar \omega \ll 1$ ⇒ $\frac{1}{e^x - 1} \stackrel{x \text{ chico}}{\approx} \frac{1}{x} \left[1 - \frac{x}{2} \right] \Rightarrow C_V \approx \frac{1}{V} \sum_{j\vec{q}} k_B T \approx \frac{N.r.d}{V} k_B T$

observación
de m.n. → $\sum_{j\vec{q}} = N.r.d$

$$C_V \approx d n r k_B$$

Recuperamos el comportamiento clásico

en red monoatómica en 3D
 $C_V \approx 3 n k_B$

• Bajas T → $\beta \hbar \omega \gg 1$ ⇒ $\sum_{j\vec{q}} \rightarrow \int_{12B} \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^3}$

Los \vec{q} se vuelven densos en la escala donde los sumandos varían

$$\epsilon = \frac{\hbar T}{(k_B)^2} \frac{3}{2k^2} \int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx$$

Mediante paso a esféricas y cambio de variables llego a

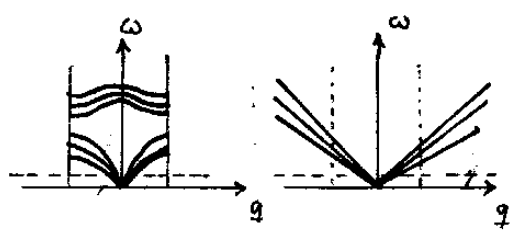
Hemos simplificado la evaluación de la integral en C_V desde:

$$C_V = \frac{\partial}{\partial T} \left(\sum_j \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^3} \frac{\hbar \omega_j(\vec{q})}{e^{\beta \hbar \omega_j(\vec{q})} - 1} \right) \quad [1]$$

a la:

$$C_V = \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{(k_B T)^4}{(\hbar c)^3} \frac{3}{2\pi^2} \int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx \right)$$

amparados en:



- Integramos en todo \vec{q} ; no solamente en la 1ZB
- Reemplazo todas las modas por una frecuencia lineal; ignoramos las ramas ópticas
- En la zona donde el aporte es grande ($\vec{q} \approx 0$) se tiene ω lineal

Resultado:

$$C_V \approx \frac{2\pi^2}{5} k_B \left(\frac{k_B T}{\hbar c} \right)^3$$

con $\omega = c \cdot q$

Esto da el comportamiento correcto con $T \rightarrow 0$. Sin embargo, en regiones de T intermedia deberíamos trabajar con la expresión completa [1]

Temperaturas Intermedias: Modelos de Einstein-Debye

• Modelo de Debye

El modelo de Debye reemplaza todas las ramas por:

$$\omega = c \cdot q$$

y la integral en [1] sobre la 1ZB se hace sobre una esfera de radio q_D : contenga N vectores \vec{q}

$n = \frac{q_D^3}{6\pi^2} \rightarrow$ Defino un q_D en analogía al k_F tal que los m.h. están ocupados

$$C_V = \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{5\pi^2}{2\pi^2} \int_0^{q_D} \frac{q^3 \cdot dq}{e^{\beta \hbar c q} - 1} \right)$$

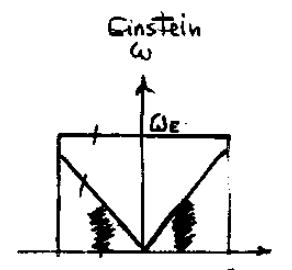
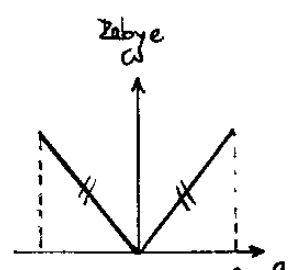
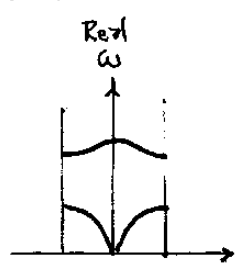
En la práctica se suele llevar esta integral a ∞ por el exceso peso del integrador con q grande.

$$C_V \propto T^3$$

Hemos representado las ramas ópticas por los valores altos de q en $\omega = c \cdot q$

• Modelo de Einstein

Un esquema alternativo es usar $\omega = c \cdot q$ para las ramas acústicas y tomar una $\omega_E = cte.$ para cada rama óptica. Esta es la aproximación de Einstein. Habrá una contribución extra al C_V dada por:



↑ Sistema con una rama acústica y una óptica

↑ Todos las ramas son lineales

↑ la acústica es lineal y la óptica es constante

TRIFAMOXIBL DUO
Amoxicilina + Sulbactam

Comprimidos x 14
Suspensión x 30 y 60 ml.

TRIFAMOX DUO
Amoxicilina

Comprimidos x 14
Suspensión x 50 y 90 ml.

TRIFAMOX DUO
Amoxicilina + Amoxicilina

Comprimidos x 14
Suspensión x 50 ml

SEPTILISIN
Cefalexina Bago

Comprimidos x 16
Suspensión x 60 ml.
Suspensión x 90 ml.

SEPTICIDE
Ciprofloxacina Bago

Comprimidos x 10

VIXCEF

Comprimidos x 6
Suspensión x 30 y 60 ml.

UROSEPTAL
NORFLOXACINA

Comprimidos x 10 y 20

Pen Di Ben
Penicilina Benzatínica

Ampollas de 1.200.000 U.I. x 1
Ampollas de 2.400.000 U.I. x 1

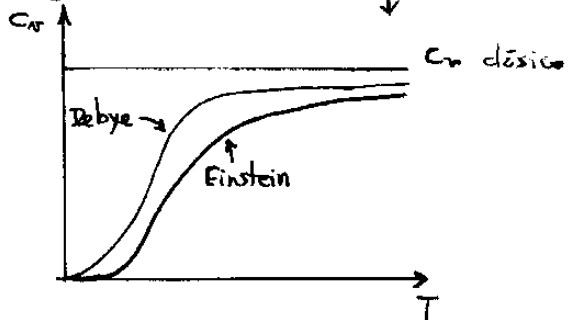
Bago
A la vanguardia en antibioterapia
www.bago.com.ar

$$\epsilon_{\text{optica}} = \frac{n^2 \hbar \omega_e}{e^{\beta \hbar \omega_e} - 1}$$

$$C_{\text{optica}} = \sum_p \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{n^2 \hbar \omega_e}{e^{\beta \hbar \omega_e} - 1} \right)$$

de ramas ópticas

En general se tendrá:



Vemos que el modelo de Einstein presenta un decaimiento exponencial a bajas T, mientras que a altas T cada rama óptica contribuye con un término constante k_B/V como marca Dulong & Petit. Una solución interpolada adecuada es sumar:

$$C_v = C_v^{\text{Debye}} + C_v^{\text{Einstein}}$$

* asociado a la dificultad de excitar un modo óptico a bajas T.

Anarmonicidades

EL modelo armónico no da un $C_v \rightarrow C_v^{\text{exp}}$ a altas T. EL modelo armónico falla pues:

- No hay transición de fase
- α (coef. térmica) $\rightarrow \infty$ [por la independencia de los modos]
- $C_v \rightarrow T$
- $\omega \neq \omega(T) \Rightarrow$ no hay expansión térmica
- Constantes elásticas indeptes. de P y T .

Ahora la energía lucirá como:

$$E = E_0 + A \left(\frac{\Delta L}{L} \right)^2 + B \left(\frac{\Delta L}{L} \right)^3 + C \left(\frac{\Delta L}{L} \right)^4$$

Interacción entre modos 'ablandamiento' de los modos \rightarrow Transición de fase

$$\alpha = \frac{1}{L} \cdot \frac{\partial \langle L \rangle}{\partial T} \quad \text{coeficiente de expansión térmica} \quad \alpha = 0 \quad \text{con } E^{[2]}$$

$$E = c_2 u^2 - c_3 u^3 - c_4 u^4$$

$$\langle L \rangle = \frac{\int dL u \cdot e^{-\beta E(u)}}{\int dL u \cdot e^{-\beta E(u)}}$$

Densidad de Estados

$$g(\omega) = \sum_s \int_{12B} \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^3} \cdot \delta(\omega - \omega_s[\vec{q}])$$

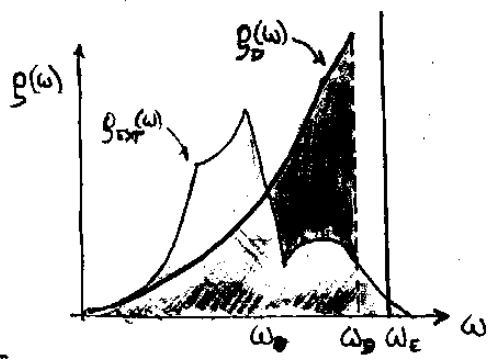
donde s corresponde a sumar las ramas

← densidad de niveles de fonones

$$g(\omega) = \sum_s \int \frac{dS}{(2\pi)^3} \frac{1}{|\nabla \omega_s(\vec{k})|}$$

← Esto presentará singularidades de Van Hove cada vez que se anula el grad $(\omega_s[\vec{k}])$.

$$g_D(\omega) = 3 \int_{q < q_D} \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^3} \delta(\omega - cq) = \frac{3}{2\pi^2} \int_0^{\omega/c} q^2 dq \delta(\omega - cq)$$



$$g_D(\omega) = \begin{cases} \frac{3}{2\pi^2} \cdot \frac{\omega^2}{c^3} & \omega < \omega_D \\ 0 & \omega > \omega_D \end{cases}$$

$$\frac{dg = d\omega}{c} \quad q^2 dq = \frac{\omega^2 d\omega}{c^3}$$

La $g_D(\omega)$ es tal que el área bajo su curva es la misma que la $g_{\text{exp}}(\omega)$

obs. Cada vez que tengo $E_n(k) \sim \text{cte.} \rightarrow$ tengo $g(E)$ divergiendo

→ asociada con divergencia de $g(E)$
→ asociada con $g(E)$ tipo e-libre

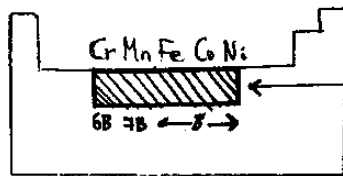
Temas de Magnetismo

Orden magnético: refiere a presentar efectos magnéticos en ausencia de campo externo.

Las fuentes de magnetismo son:

- spin del electrón
- Momento orbital magnético

Para tener momento magnético no nulo en un átomo necesito capa abierta. Casi todos los átomos tienen mom. magnético permanente pero pocos generan orden magnético



Tienen orden magnético, tienen capa 3d llena con más de la mitad



Comprimidos x 14
Suspensión x 30 y 60 ml.



Comprimidos x 14
Suspensión x 50 y 90 ml.



Comprimidos x 14
Suspensión x 50 ml



Comprimidos x 16
Suspensión x 60 ml.
Suspensión x 90 ml.



Comprimidos x 10



Comprimidos x 6 y 10
Suspensión x 30 y 60 ml.



Comprimidos x 10 y 20



Ampollas de 1.200.000 U.I. x 1
Ampollas de 2.400.000 U.I. x 1



Sistemas no magnéticos [no tienen orden de largo alcance]	Aislantes	<ul style="list-style-type: none"> • Diamagnetismo de Larmor Capa llena: $\vec{m} = 0$ generan corrientes o puestas al campo externo. Capa semillena: $\vec{m} \neq 0$ tienden a orientarse con el campo. • Paramagnetismo orbital
	Metales	<ul style="list-style-type: none"> • Diamagnetismo Landau [por el mov. electrónico] • Paramagnetismo de Pauli [origen en el spin de los electrones \Rightarrow necesito capa semillena]
Sistemas magnéticos [orden de largo alcance]	No Metales	■ Modelo de Heisenberg
	Metales (e- no localizados)	<ul style="list-style-type: none"> ■ Magnetismo de spin: Modelo de Stoner • ferromagnetismo $\vec{M} \neq 0$ • antiferromagnetismo $\vec{M} = 0$ • ferrimagnetismo $\vec{M} \neq 0$ [de menor cantidad que ferrom. pues hay diferentes \vec{m}_i]

$$\chi = \frac{1}{V} \cdot \frac{\partial \bar{M}}{\partial B}$$

Susceptibilidad: es la función respuesta

$\chi > 0$ Paramagnético
 $\chi < 0$ Diamagnético

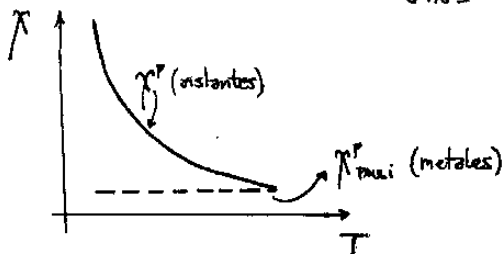
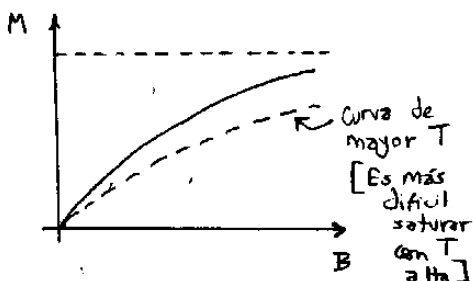
Magnetismo en aislantes

$$\chi^p \propto \frac{1}{T} \quad \leftarrow \text{[Ley de Curie]}$$

$$\chi^p = \frac{N}{V} g \mu_B \frac{J(J+1)}{k_B T}$$

$$\chi^d \neq \chi^d(T)$$

$$\chi^p \gg \chi^d(T_{AMB})$$



- Aislantes
 - $\vec{J} = \vec{L} = \vec{S} = 0 \Rightarrow$ Capa llena
 - $\vec{J} = 0$
 - $\vec{J} \neq 0 \rightarrow$ } \Rightarrow Capa semillena
- χ^p importante aquí

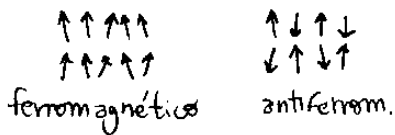
HUND

- S_{max}
- L_{max}
- $J_{max} \rightarrow$ Mitad + 1 lleno
- $J_{min} \rightarrow$ Mitad + 1 vacía

Las reglas de Hund establecen la forma de los momentos magnéticos de los átomos.

• Sistemas con Orden Magnético

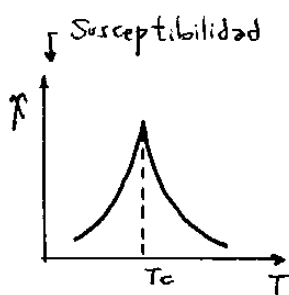
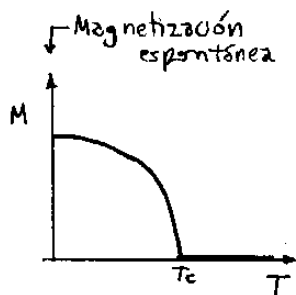
Un sistema que presenta orden magnético tiene, para $T < T_c$, formación de dominios macroscópicos. Que un sistema sea magnético o no depende de la minimización de la energía. La interacción de intercambio la justifica. También aporta la interacción spin-órbita [que aumenta con la disminución de la dimensionalidad].



EL hamiltoniano de Heisenberg nos provee un modelo ferromag.

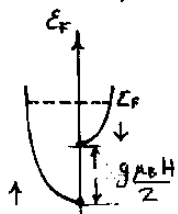
$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$$

← hamiltoniano de Heisenberg



$\chi \propto \frac{1}{(T - T_c)}$ divergencia logarítmica

En un sistema paramagnético metálico es el spin toda la contribución. Paramagnetismo de Pauli supone que $\vec{L} = 0$ pero $\vec{S} \neq 0$



$$\epsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{g \mu_B \vec{S} \cdot \vec{H}}{\hbar}$$

$$M = \mu_B g(E_F) H$$

$\chi^p \propto$ cte. (no depende de T)

• Interacción magnética en un gas de electrones libres

Sumamos al gas de e-libres la antisimetría de Ψ

$$\Psi_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1 \psi_2 - \psi_2 \psi_1)$$

← Metemos ondas planas en el determinante de Slater

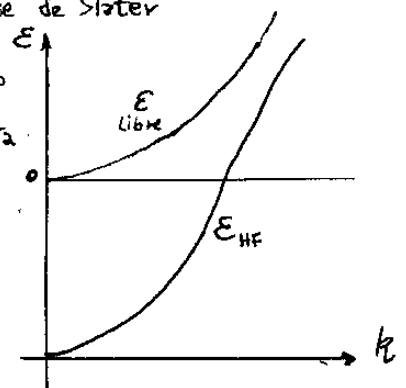
$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{1}{V} \sum_{k, k'} \frac{4\pi e^2}{|k - k'|^2}$$

surgió un término de intercambio que baja la energía

$$E = N \left[\frac{3}{5} (k_F a_0)^2 - \frac{3}{2\pi} (k_F a_0) \right] \frac{e^2}{2a_0}$$

$$E = N \left[\frac{3}{10} \frac{\hbar^2 k_F^2}{m} - \frac{3}{4\pi} k_F e^2 \right]$$

← proviene del término de intercambio



Polarización

$$\frac{N^{\uparrow} - N^{\downarrow}}{N} = P \Rightarrow N^{\uparrow} = \frac{N}{2} (1 + P)$$

$$m = -g \mu_B \left(\frac{N^{\uparrow} - N^{\downarrow}}{V} \right)$$

← densidad de magnetización

Luego una expresión para $E(P)$. Con $E(P=0)$ no hay \vec{M} y tengo un mínimo de energía.



Comprimidos x 14
Suspensión x 30 y 60 ml.



Comprimidos x 14
Suspensión x 50 y 90 ml.

Son modelos de partícula independiente



Comprimidos x 14
Suspensión x 50 ml



Comprimidos x 16
Suspensión x 60 ml.
Suspensión x 90 ml.



Comprimidos x 10



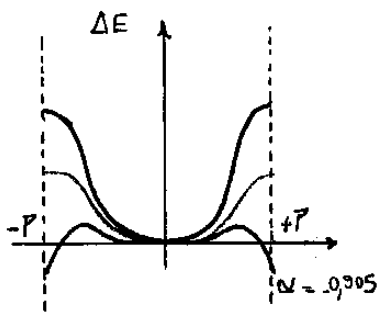
Comprimidos x 6 y 10
Suspensión x 30 y 60 ml.



Comprimidos x 10 y 20



Ampollas de 1.200.000 U.I. x 1
Ampollas de 2.400.000 U.I. x 1



Definiendo:

$$\Delta E = E(P) - E(P=0)$$

tengo una solución más estable con la curva azul.

La transición se da cuando:

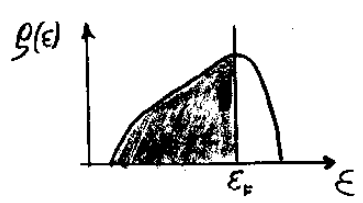
$$\frac{r_s}{a_0} > 5,4 \quad , \quad \text{y} \quad \alpha = f(r_s/a_0)$$

Este comportamiento no se observa en la realidad porque a este modelo le falta la correlación. Los sistemas que presentan \vec{M} son sólidos. Los electrones responsables del magnetismo en la materia son los 4d, 5d; no los libres.

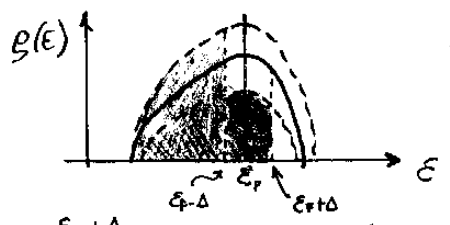
Los sistemas que presentan \vec{M} son sólidos. Los electrones responsables del magnetismo en la materia son los 4d, 5d; no los libres.

Modelo de Stoner

Modelo para metales que tiene en cuenta el término de intercambio.



$$N = N^{\uparrow} + N^{\downarrow}$$



$$N^{\uparrow} = \int_{-\infty}^{\epsilon_F + \Delta} g(\epsilon) \cdot d\epsilon \quad (\text{a } T=0)$$

$$N^{\downarrow} = \int_{-\infty}^{\epsilon_F - \Delta} g(\epsilon) \cdot d\epsilon$$

La $g(\epsilon)$ se splita en dos.

$$\frac{M}{\mu_B} = N^{\uparrow} - N^{\downarrow} \rightarrow \frac{M}{\mu_B} \approx 2\Delta g(\epsilon_F)$$

La energía de intercambio es

$$E_x = -J \left(\frac{N^{\uparrow}(N^{\uparrow}-1)}{2} + \frac{N^{\downarrow}(N^{\downarrow}-1)}{2} \right) \leftarrow \text{Interacción con electrones del mismo spin}$$

$$E_x(P) - E_x(P=0) = \frac{J M^2}{4}$$

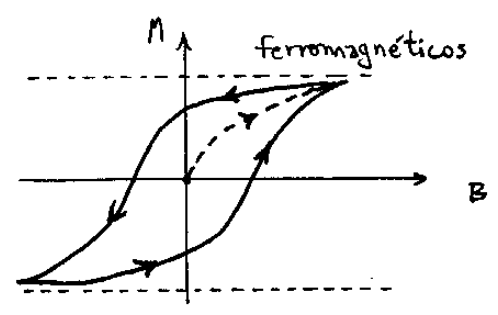
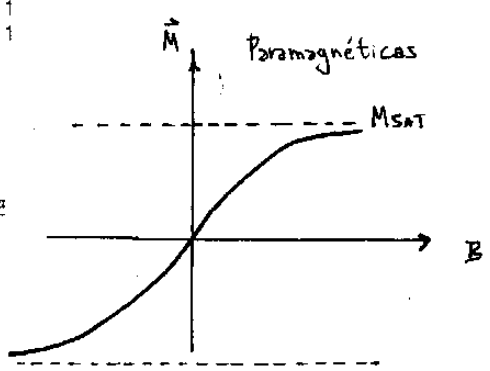
$$J = \frac{1}{g(\epsilon_F)} \rightarrow$$

$$M = (N^{\uparrow} - N^{\downarrow}) \mu_B$$

si $J g(\epsilon_F) > 1$ Condición de sistema ferromagnético

$$g(\epsilon_F) = (g^{\uparrow} + g^{\downarrow}) \frac{1}{2}$$

J varía poco entre los elementos 3d (1eV/átomo). Para modificar el \vec{M} se requiere aumentar la densidad de estados (subir # vecinos ó bien disminuir la dimensionalidad del problema)



Sobre la discretización y las condiciones de contorno



Comprimidos x 14
Suspensión x 30 y 60 ml.



Comprimidos x 14
Suspensión x 50 y 90 ml.



Comprimidos x 14
Suspensión x 50 ml



Comprimidos x 16
Suspensión x 60 ml.
Suspensión x 90 ml.



Comprimidos x 10



Comprimidos x 6
Suspensión x 30 y 60 ml.



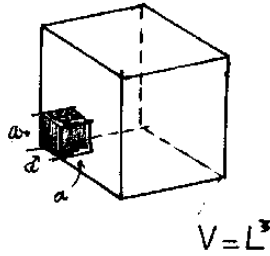
Comprimidos x 10 y 20



Ampollas de 1.200.000 U.I. x 1
Ampollas de 2.400.000 U.I. x 1



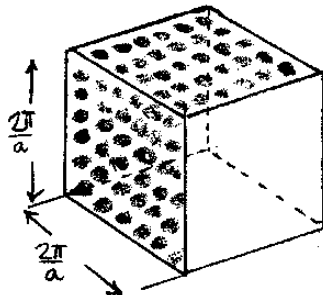
Tratamos con estructuras SC



Cristal real \rightarrow N electrones
 $L^3 = V$ volumen

$$\frac{N}{V} = n \quad \text{densidad de electrones}$$

$a^3 =$ volumen celda primitiva real



$\left(\frac{2\pi}{a}\right)^3 =$ volumen celda primitiva red recíproca

Por condiciones Born-Von Karman es:

$$\vec{k} = \frac{2\pi}{L} (n_x \hat{x} + n_y \hat{y} + n_z \hat{z})$$

$$\Delta \vec{k} = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^3 = \text{Volumen de un } \vec{k} \text{ permitido}$$

$$\# \text{ celdas prim. reales} = q = \frac{V}{a^3}$$

$$q = \frac{V}{a^3} \frac{(2\pi)^3}{(2\pi)^3} = \frac{\left(\frac{2\pi}{a}\right)^3}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3} = \frac{\text{Volumen Celda prim. recíproca}}{\text{Volumen de un } \vec{k} \text{ permitido}} = \# \text{ } \vec{k} \text{ permitidos en una celda recíproca}$$

$$q = \frac{V}{(2\pi)^3} \cdot \left(\frac{2\pi}{a}\right)^3 = \# \vec{k} \text{ perm.} \cdot \text{Volumen Celda prim. recip.} =$$

$$n = \frac{N}{V} = \frac{N}{a^3 \cdot q} = \frac{Nq}{a^3} \rightarrow \text{electrones x celda}$$

$$\# \vec{k} \text{ perm. en una celda recíproca} = q = \# \text{ celdas reales}$$

Mi sistema tiene N electrones $\rightarrow \left(\frac{N}{2}\right)$ \vec{k} perm. Totales \Rightarrow si $Nq = 1 \rightarrow$

$N = q \Rightarrow$ hay N

\vec{k} perm. en la celda recíproca (me alcanza con $1/2$ celda para tenerlos todos)

Esfera de Fermi. Lleno todos los volumencitos hasta k_F .

$$V = \frac{4}{3} \pi k_F^3$$

$$\text{volumen } \vec{k} \text{ permitido} \cdot \# \vec{k} \text{ permitidos} = \text{volumen esfera Fermi}$$

$$\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3 \cdot \# \vec{k} \text{ perm.} = \frac{4}{3} \pi k_F^3$$

$$\# \vec{k} \text{ perm.} = \frac{V \cdot 4\pi k_F^3}{8\pi^3/3}$$

$$\# \vec{k} \text{ perm.} = \frac{V k_F^3}{6\pi^2}$$

un \vec{k} permitido puede tener 2 electrones

$$\downarrow$$

$$\frac{N}{2} = \frac{V k_F^3}{6\pi^2}$$

$$n = \frac{k_F^3}{3\pi^2}$$

$$\frac{Nq}{a^3} = \frac{k_F^3}{3\pi^2}$$

$$k_F = \left(\frac{3\pi^2 Nq}{a^3}\right)^{1/3}$$