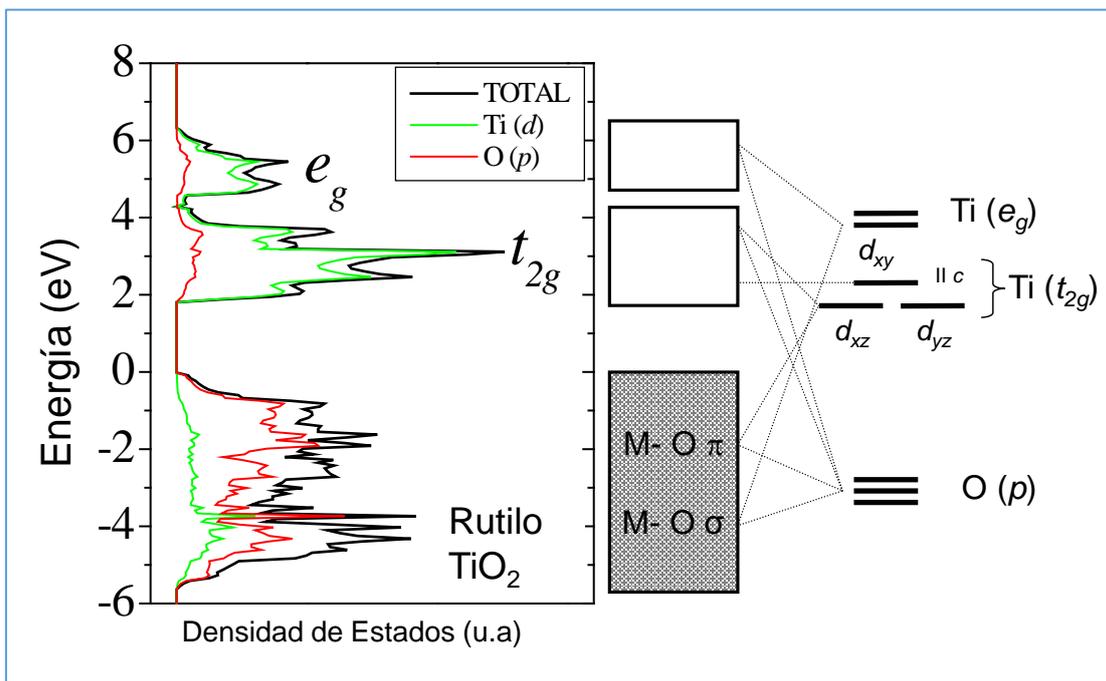


EJERCICIOS DE INTRODUCCIÓN A LA TEORÍA DE BANDAS

Dra. M^a Elena Arroyo y de Dompablo
Departamento de Química Inorgánica
Universidad Complutense de Madrid





Índice

Prólogo.....	2
Introducción.....	3
Ejercicio 1: Cadena de átomos de H	4
Ejercicio 2: Cadena de átomos de N	5
Ejercicio 3: Plano de átomos de Fe.....	6
Ejercicio 4: Potencial periódico de Kronig-Penney.....	7



UNIVERSIDAD COMPLUTENSE
DE MADRID

EJERCICIOS DE INTRODUCCIÓN A LA TEORÍA DE BANDAS

Dra. Elena Arroyo y de Dompablo

Dpto. Química Inorgánica

Prólogo

Los ejercicios aquí presentados se han elaborado para estudiantes de la asignatura de Química Inorgánica I del Grado en Química de la Facultad de Ciencias Químicas de la Universidad Complutense de Madrid. Constituyen una primera aproximación a la teoría de bandas, a partir de los modelos del enlace firme y del electrón libre, enfocada a alumnos de este nivel académico. A través del estudio de hipotéticos casos sencillos y de fácil comprensión, el alumno se familiariza con conceptos fundamentales como pueden ser el solapamiento orbital, el vector de ondas o la densidad de estados.

La autora agradece a las Profesoras M^a José Torralvo Fernández y Susana García Martín del Departamento de Química Inorgánica de la universidad Complutense de Madrid sus comentarios y aportaciones a estos ejercicios.

Primera versión: Madrid, Febrero 2020

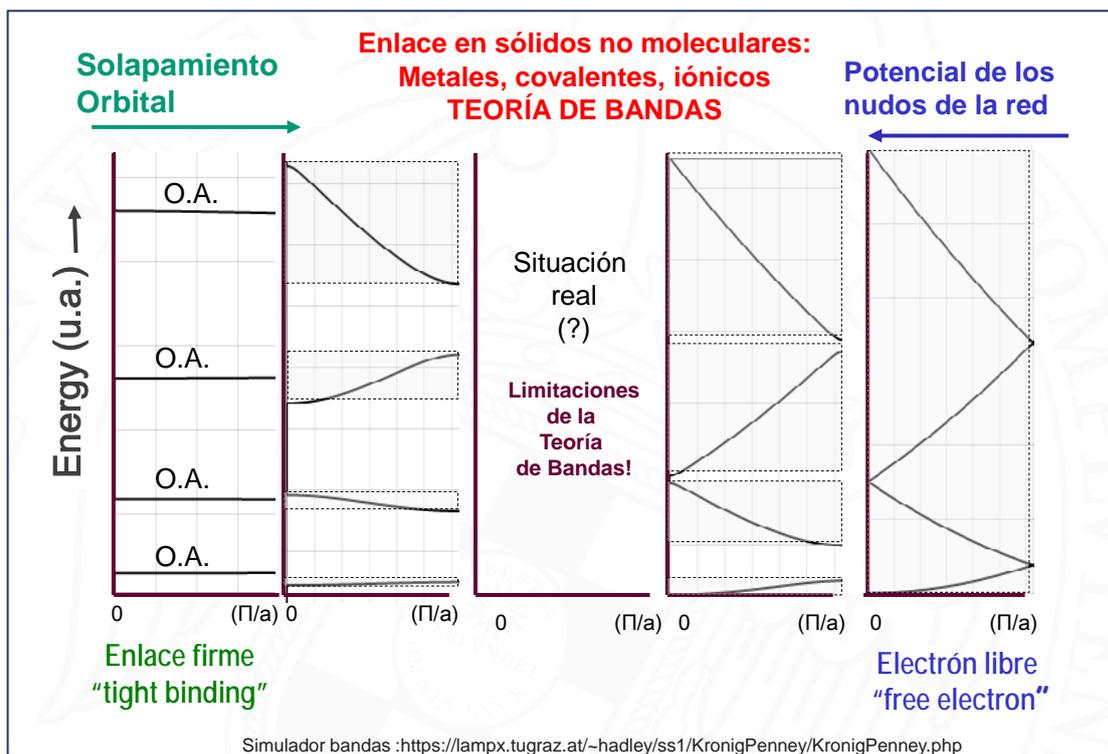
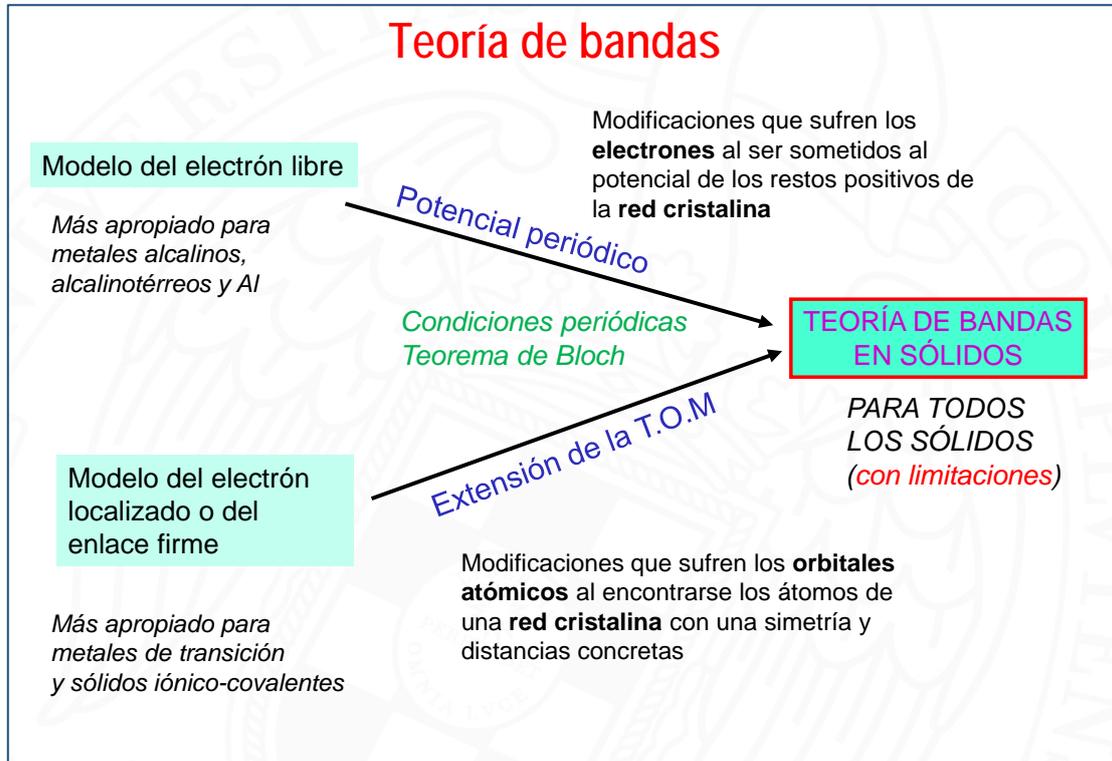
LICENCIA: Creative Commons Attribution-NonCommercial-ShareAlike 4.0

Nº Registro: 2005033861435

Fecha registro: 4 Mayo 2020



Introducción



Ejercicio1. La siguiente figura muestra la estructura de bandas calculada para una cadena de átomos de H separados por una distancia d de 1.1 Å (figura A) , 1.5 Å (figura B) y 3 Å (figura C).

- La línea horizontal punteada indica el nivel de energía de los orbitales atómicos que intervienen en la formación de la banda del cristal. Puesto que son átomos de H, ¿De qué orbital atómico se trata?. ¿Cuál es su ocupación?
- Tomando la figura central, ¿Qué energía tiene el orbital menos energético del cristal? ¿Y el más energético?. Exprese la energía en función de k , α y β . ¿Cuál es la anchura de la banda? ¿Y el valor de β ?
- Las figura de la izquierda/derecha muestran la modificación del diagrama central al disminuir/aumentar la distancia entre los átomos de H. ¿Cómo varía β ?. ¿Puede relacionarlo con la fortaleza del enlace?. ¿Qué ocurrirá a una distancia de 5 Å?.
- Teniendo en cuenta el número de electrones que deben colocarse en la banda formada, discuta cuál de las tres figuras representa una situación energética más estable

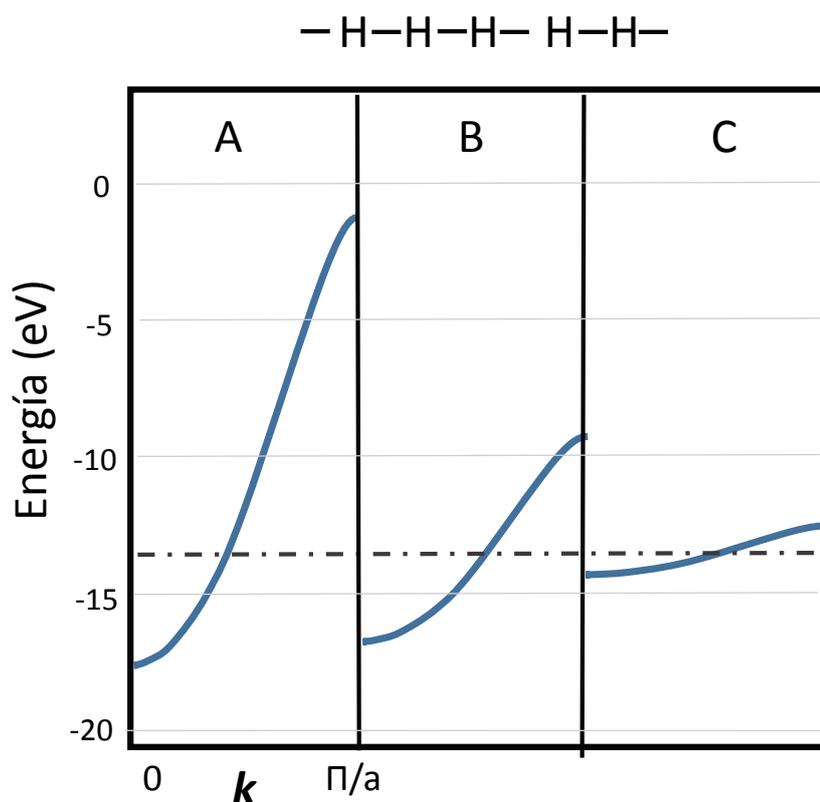


Figura 1. Adaptada de **Orbital Interactions in Chemistry**, Albright, Burdett & Whangbo, Wiley 2013

Ejercicio 2. La siguiente figura muestra la estructura de bandas calculada para una cadena de átomos A de configuración $2s^2p^x$ separados por una distancia a .

- ¿Cuántas bandas aparecen en el diagrama? ¿Qué representa el eje x ? Indique qué valores toma el vector de onda en los puntos Γ y X , en función de la distancia entre los átomos a . Sitúe en el eje y , de forma aproximada, la energía de los orbitales atómicos s , p_z y p_y .
- La figura muestra el solapamiento tipo σ de los orbitales s (enlazante y antienlazante). Dibuje los solapamientos correspondientes para los orbitales p . Comente razonadamente si el solapamiento de los orbitales p_z , p_y y p_x es igual o diferente.
- Comente el signo de β y su valor absoluto para cada una de las bandas. ¿Qué banda es la más estrecha? ¿Por qué?
- Dibuje un el diagrama de bandas (esquema bandas rectangulares) a la derecha de la figura. ¿Solapan las bandas s y p ?
- En el esquema que ha dibujado, coloque de forma aproximada el nivel de Fermi si A es N. ¿Se trata de un aislante o de un conductor?
- Coloque el nivel de Fermi suponiendo que $A = \text{Mg}$. ¿Cómo modificaría la estructura de bandas para llegar a un comportamiento metálico?.

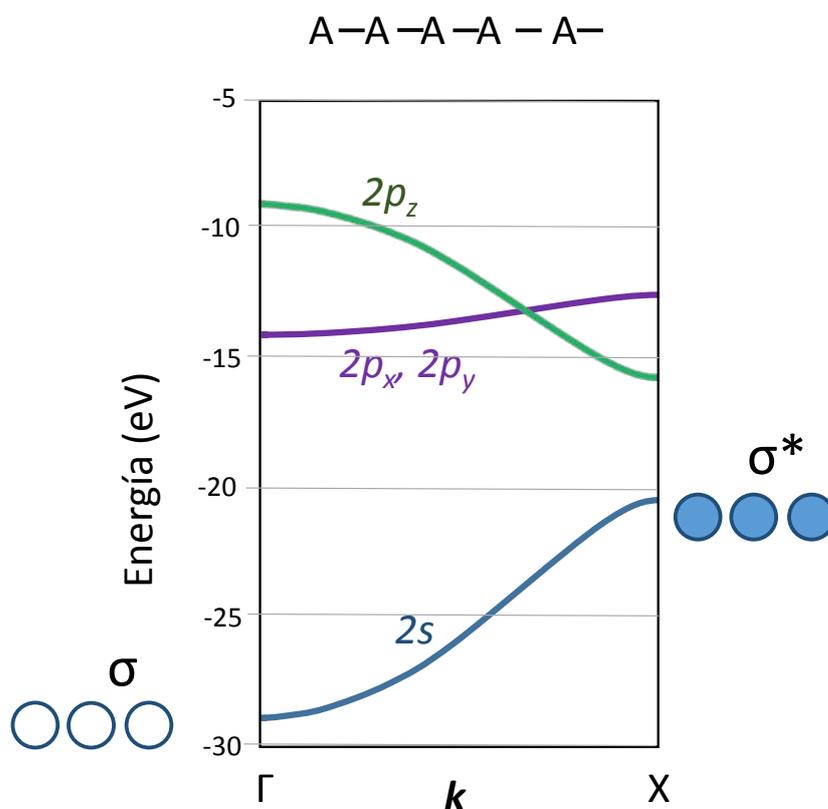


Figura 2. Adaptada de **Computational Chemistry of Solid State**, Dronskowski, Wiley 2005.

Ejercicio 3. La siguiente figura muestra la estructura de bandas de bandas (sólo orbitales d) calculada para una red plano-cuadrada de átomos de Fe, y su correspondiente densidad de estados

- ¿Qué se representa en el eje x de cada figura?.
- Escriba la expresión de la energía de los orbitales del cristal en función de K , α y β . ¿Qué es β ? ¿Y α ? . El solapamiento, ¿es igual para todos los orbitales d ? ¿Por qué?. Explíquelo dibujando los orbitales que considere en la red de átomos (Recuerde la disposición de los orbitales d en el espacio)
- Si los átomos formasen una red hexagonal, ¿se modificaría la estructura de bandas?
- Indique la anchura de la banda d en eV y en kJ/mol.
- La densidad de estados está formada por la suma de las contribuciones de cada tipo de orbital del cristal. ¿Cuántos electrones pueden colocarse en la densidad de estados de la figura?.
- Teniendo en cuenta la configuración electrónica del Fe, dibuje el nivel de Fermi en la densidad de estados. ¿Se trata de un conductor o de un semiconductor?

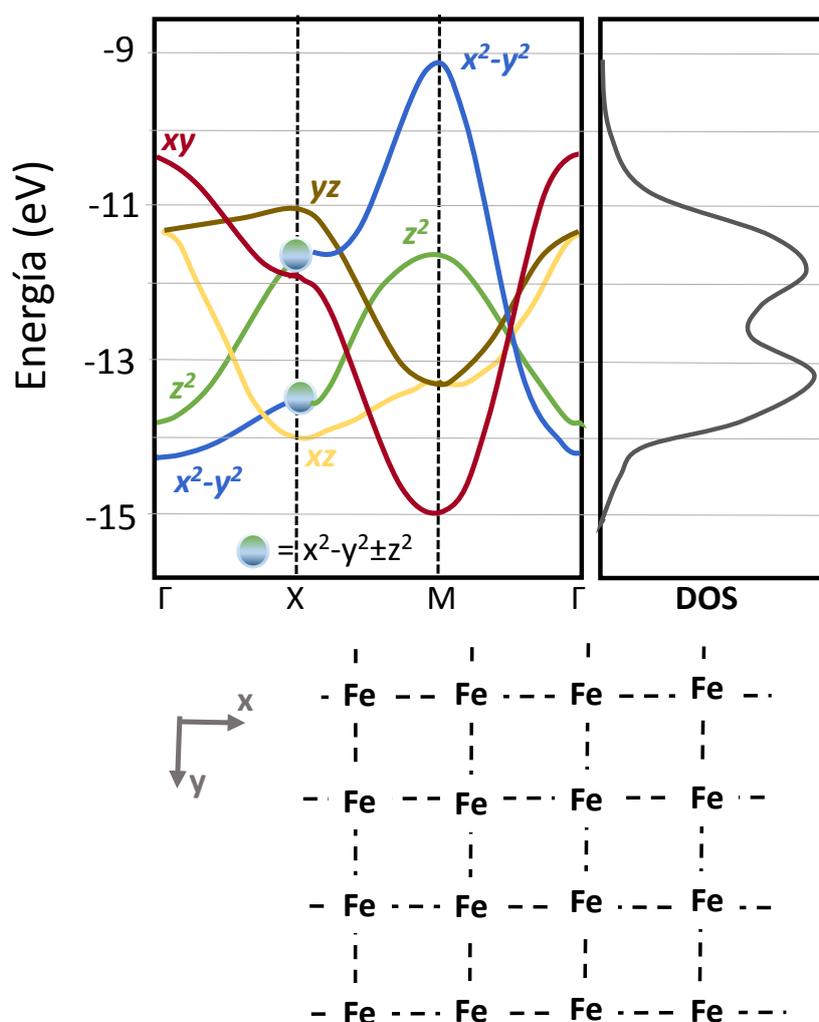
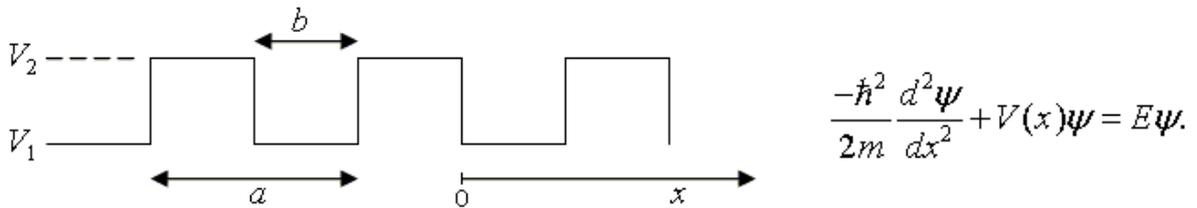


Figura 3. Adaptada de **Computational Chemistry of Solid State**, Dronskowski, Wiley 2005

Ejercicio 4. La siguiente figura muestra el modelo de potencial periódico de Kronig-Penney



Con este modelo, manteniendo a , b , x , y V_1 constantes, se ha simulado la estructura de bandas para los siguientes valores del potencial V_2 : A = 0 eV, B = 5 eV, C = 20 eV y D = 50 eV. Identificar los casos A, B, C y D en las figuras. Dibuje a la derecha el correspondiente esquema aproximado de bandas rectangulares. ¿Cuál se acercaría al resultado de la teoría del electrón libre?

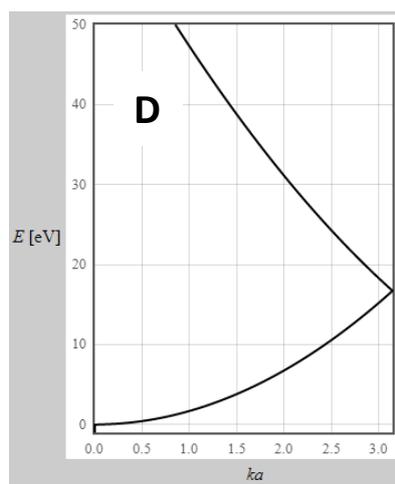
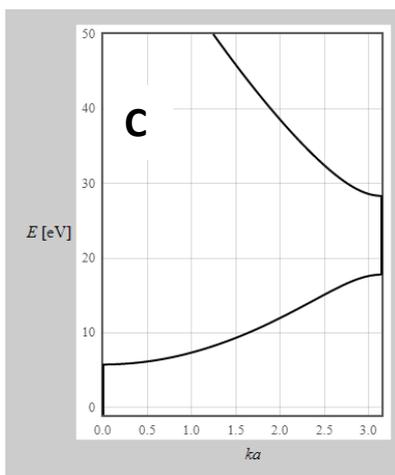
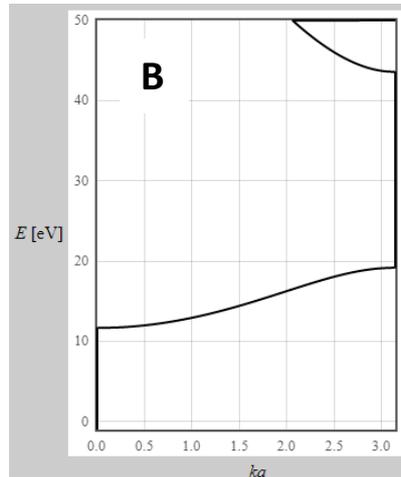
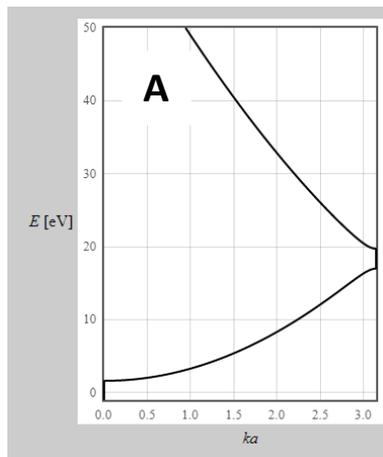


Figura ejercicio 4. Realizada con el simulador bandas

<https://lampx.tugraz.at/~hadley/ss1/KronigPenney/KronigPenney.php>