

### **Tercera reunión (RAD-SOOT)**

Día 16 de Octubre de 2020

Sesión Teams

**Tema:** Avances en modelo de dispersión para el  $m$

**Asistentes:** M. Lapuerta, S. González, D. Bolonio, A. Cova, R. Ballesteros

David Bolonio realiza una introducción de conceptos generales necesarios para definir alguno de los parámetros del modelo (relacionados con relación entre unidades eV, nm, etc, modelo de Schrodinger, la masa efectiva, Teoría de orbitales moleculares, HOMO, LUMO, etc).

Seguimos con dudas respecto del 1/12 y los valores de 1.25 y 7.25 en el artículo de Lee and Tien.

Hacer resumen y plantear dudas.

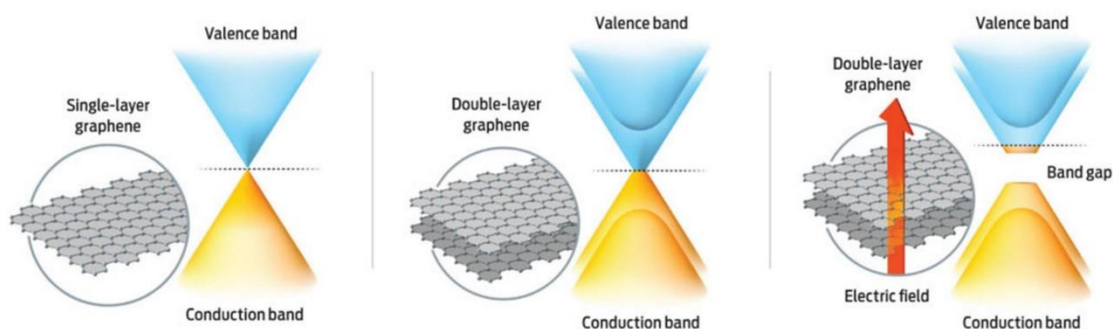
Posible ayuda de expertos para orientarnos y aclarar conceptos.

Próxima reunión: Jueves 22 a las 10.00

## RESUMEN CHARI (CONCEPTOS BÁSICOS)

Es bien sabido que algunas de las características fundamentales de un cristal, además de las ópticas y de transporte, son las vibracionales y elásticas. Las zonas de Brillouin representan el intervalo adecuado donde se presenta la dinámica del electrón con las energías aceptables del sistema. A partir de ellas es posible determinar los puntos silla y por ende el *gap* del material. La energía del *gap* entre las bandas de valencia y de conducción son de importancia fundamental en las propiedades de un sólido, ya que cambios en el *gap* alteran significativamente las propiedades físicas y químicas del material. Esto ocurre cuando el tamaño de un sólido es reducido a escala nanométrica. Por ello es importante entender la dinámica del electrón dentro de una nanoestructura.

A pesar de que la estructura del grafito ha sido estudiada intensivamente, algunos tópicos relacionados con la interacción entre capas y su efecto en las propiedades electrónicas constituyen aun materia de discusión. Estas últimas han sido analizadas por medio de modelos parametrizados con simplificaciones teóricas que limitan la validez de los resultados, según Velazquez-Arriaga en 2009. El primero en describirlo utilizando la aproximación *tight-binding* fue Wallace en 1947, considerando la interacción de los orbitales  $p_z$  a vecinos más cercanos descuidando la superposición entre las funciones de onda de los diferentes átomos; Saito *et al.* realizaron otra aproximación, en la cual consideraron el solapamiento entre las funciones base incluyendo las interacciones entre los vecinos más cercanos dentro de una lámina. Esta misma aproximación se ha aplicado a nanotubos de carbono, tal y como lo hizo Reich haciendo la consideración hasta terceros vecinos para investigar la dispersión de las bandas electrónicas de los orbitales  $\pi$  y  $\pi^*$  [12].



El solapamiento de un gran número de orbitales atómicos conduce a un conjunto de orbitales moleculares que se encuentran muy próximos en energías y que forman virtualmente lo que se conoce como una banda. Las bandas se encuentran separadas entre sí mediante espacios energéticos a los que no les corresponde ningún orbital molecular

Para poder visualizar la formación de una banda considérese una distribución lineal de átomos (sólido unidimensional), separados todos a la misma distancia, en los que cada átomo posee un orbital de tipo  $s$ . Cada orbital de tipo  $s$  de un átomo solapará con el orbital  $s$  del átomo vecino. Así, si sólo hubiera dos átomos en el conjunto el solapamiento conduciría a la formación de 2 orbitales moleculares, uno de enlace y otro de antienlace. Si tenemos 3 átomos, el solapamiento de los 3 orbitales de tipo  $s$  originaría la formación de 3 orbitales moleculares, de enlace, de no enlace y de antienlace. A medida que se van añadiendo átomos al conjunto cada uno contribuye con su orbital molecular al solapamiento y en consecuencia se obtiene un nuevo orbital

molecular. Así, cuando el conjunto está formado por N átomos se obtienen N orbitales moleculares. El orbital molecular de menor energía no presenta ningún nodo entre los átomos vecinos, mientras que el orbital molecular de mayor energía presenta un nodo entre cada par de átomos vecinos.

Los restantes orbitales van teniendo sucesivamente 1, 2, 3... nodos internucleares y sus energías están comprendidas entre la del orbital más enlazante (de menor energía) y la del más antienlazante (mayor energía). La diferencia de energía entre los N orbitales moleculares es tan pequeña que se forma una banda o continuo de niveles de energía. La anchura total de la banda depende de la fuerza de la interacción entre los orbitales atómicos de los átomos vecinos, de forma que, cuanto mayor sea la interacción, mayor será el solapamiento entre los orbitales y mayor será la anchura de la banda resultante (o separación entre el orbital molecular más enlazante y el más antienlazante). La anchura de una banda es, por lo general, una medida del grado de localización del enlace. Una banda estrecha representa un alto grado de localización de un enlace y a medida que se va haciendo más ancha los enlaces se hacen más deslocalizados.

La banda que se ha descrito se ha formado a partir del solapamiento de orbitales s y se denomina, por tanto, banda s. Si en los átomos existen orbitales de tipo p disponibles, éstos pueden solapar originando una banda p. Como los orbitales p poseen mayor energía que los orbitales s de la misma capa, se observa a menudo la separación entre la banda s y la banda p. Pero si las bandas son anchas y las energías de los orbitales s y p de la misma capa no difieren mucho entonces ambas bandas se solapan.

## El modelo de bandas

