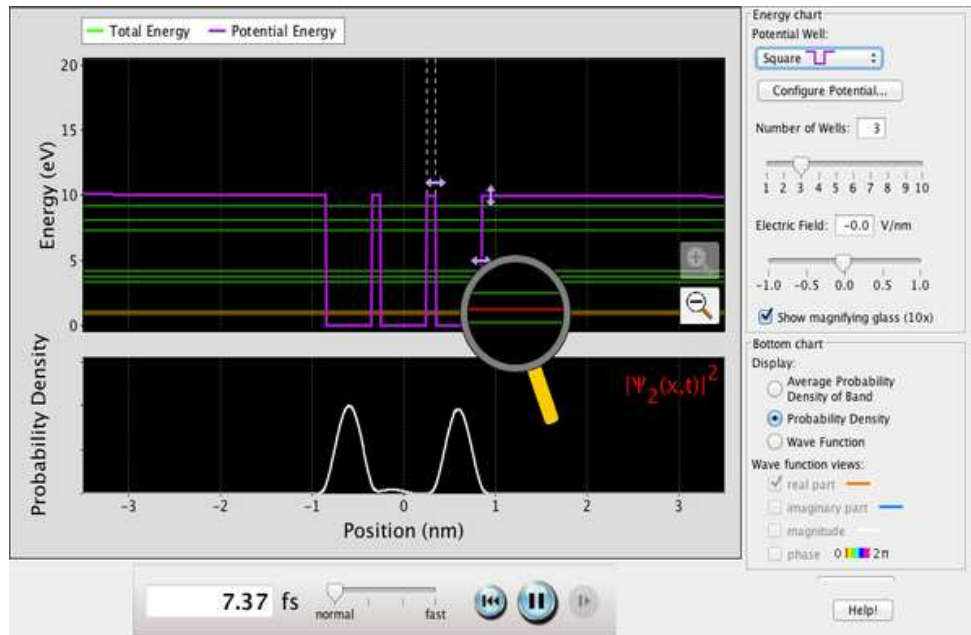


Estructura de Bandas

Autor: Patricia Abdel Rahim



Debe incluir todos los cálculos

Objetivos

Observar las funciones de onda y la densidad de probabilidad para un pozo de potencial.

Introducción

1. Entrar página

<https://phet.colorado.edu/en/simulation/legacy/band-structure> [3]

2. Donde podemos obtener el valor de:

a) La separación entre las paredes del pozo (0.1 a 0.5 eV).

b) El alto del pozo (0 eV a 20 eV).

c) La energía total y potencial de la partícula de acuerdo a la posición respecto al pozo.

Y si aumentas el número de pozos veras las bandas con su respectivo calor de energía total.

Procedimiento

Ejercicio 1: Con un solo pozo de potencial cuadrado. Complete la siguiente tabla

| Longitud del pozo [nm] | 0,1 | 0,2 | 0,3 | 0,4 | 0,5 |
|--|-----|-----|-----|-----|-----|
| Energía total en el estado fundamental de la simulación [eV] | | | | | |
| Energía total en el estado fundamental teórico [eV] | | | | | |

Calcule el valor teórico de la energía total para cada ancho del pozo y compárelo con el valor de la simulación. Halle el error relativo.

Ejercicio 2:

Al aumentar el tamaño del pozo que observa con relación a la energía total en el estado fundamental y la energía potencial.

Ejercicio 3:

Al aumentar el número de pozos note los valores de las energías totales. Únicamente la del estado fundamental. Complete la siguiente tabla

| Longitud del pozo [nm] | 0,1 | | 0,2 | | 0,3 | | 0,4 | | 0,5 | |
|--|---------|------|---------|------|---------|------|---------|------|---------|------|
| | 1 pozo | [eV] | 1 pozo | [eV] | 1 pozo | [eV] | 1 pozo | [eV] | 1 pozo | [eV] |
| Energía total en el estado fundamental de la simulación [eV] | 2 pozo | | 2 pozo | | 2 pozo | | 2 pozo | | 2 pozo | |
| | 3 pozo | | 3 pozo | | 3 pozo | | 3 pozo | | 3 pozo | |
| | 4 pozo | | 4 pozo | | 4 pozo | | 4 pozo | | 4 pozo | |
| | 5 pozo | | 5 pozo | | 5 pozo | | 5 pozo | | 5 pozo | |
| | 6 pozo | | 6 pozo | | 6 pozo | | 6 pozo | | 6 pozo | |
| | 7 pozo | | 7 pozo | | 7 pozo | | 7 pozo | | 7 pozo | |
| | 8 pozo | | 8 pozo | | 8 pozo | | 8 pozo | | 8 pozo | |
| | 9 pozo | | 9 pozo | | 9 pozo | | 9 pozo | | 9 pozo | |
| | 10 pozo | | 10 pozo | | 10 pozo | | 10 pozo | | 10 pozo | |

Ejercicio 4:

Note el número de niveles de energía que se muestran en la simulación al aumentar el número de pozos.

| Longitud del pozo [nm] | 0,1 | | 0,2 | | 0,3 | | 0,4 | | 0,5 | |
|---|---------|------|---------|------|---------|------|---------|------|---------|------|
| Numero de niveles de energía que aumenta al aumentar el número de pozos | 1 pozo | [eV] | 1 pozo | [eV] | 1 pozo | [eV] | 1 pozo | [eV] | 1 pozo | [eV] |
| | 2 pozo | | 2 pozo | | 2 pozo | | 2 pozo | | 2 pozo | |
| | 3 pozo | | 3 pozo | | 3 pozo | | 3 pozo | | 3 pozo | |
| | 4 pozo | | 4 pozo | | 4 pozo | | 4 pozo | | 4 pozo | |
| | 5 pozo | | 5 pozo | | 5 pozo | | 5 pozo | | 5 pozo | |
| | 6 pozo | | 6 pozo | | 6 pozo | | 6 pozo | | 6 pozo | |
| | 7 pozo | | 7 pozo | | 7 pozo | | 7 pozo | | 7 pozo | |
| | 8 pozo | | 8 pozo | | 8 pozo | | 8 pozo | | 8 pozo | |
| | 9 pozo | | 9 pozo | | 9 pozo | | 9 pozo | | 9 pozo | |
| | 10 pozo | | 10 pozo | | 10 pozo | | 10 pozo | | 10 pozo | |

Ejercicio 5:

Pinte la forma que toma la función de onda al aumentar el número de pozos. Explique.

Ejercicio 6:

Al aumentar el número de pozos es posible observar las bandas de valencia y las bandas de conducción en esta simulación. Explique.

Bibliografía

[1] <https://zronyj.wordpress.com/2012/04/17/particula-en-una-caja/>

[2] <http://corinto.pucp.edu.pe/quimicageneral/contenido/35-enlace-metalico.html>

[3] Author the Applet: PhEt-University of Colorado Boulder

Indique sus conclusiones, sugerencias y bibliografía.