

PARCIAL 1, PARCIAL 2 Y EXAMEN FINAL

MATERIA CONDENSADA

Diego Sarceño

201900109

Guatemala, 6 de diciembre de 2022

Parcial 1

Problema 1

- (a) Tomando un subconjunto propio finito (Λ) no vacío de puntos en un espacio \mathbb{R}^d , la Celda de Voronoi para un punto $a \in \Lambda$ se define como

$$V(a) := \{x \in \mathbb{R}^d : \|x - a\| \leq \|x - b\| \forall b \in \Lambda\}.$$

Donde la norma mostrada es la norma euclídeana. Cada punto en Λ tiene una Celda de Voronoi definida y esta es un polinomio. Las Celdas de Delone se forman con los elementos de Λ como vértices. Explicado de otra forma para facilitar su visualización, los vértices de las celdas de Voronoi son los circuncentros de todas las Celdas de Delone que tienen como vértice común el punto a , esto para cualquier polinomio de celdas de Delone (en dos dimensiones, vease figura 1).

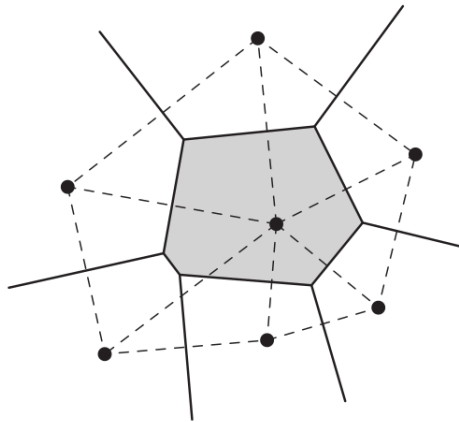


Figura 1: Celda de Voronoi mostrada como línea continua, Celda de Delone como línea punteada. Figura 2.1. de [1].

- (b) La Celda de Wigner–Seitz es un tipo de celda primitiva (celda con volumen mínimo) trazada por un método llamado igual que la celda (figura 2).

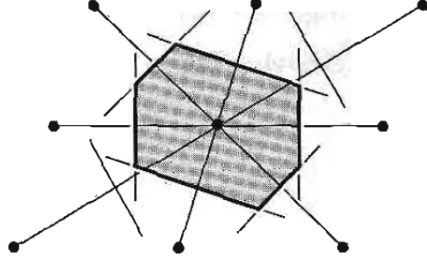


Figura 2: Para trazar la Celda de Wigner–Seitz, se trazan líneas desde un punto previamente dado hasta todos los puntos más cercanos. En el punto medio de dichas líneas se trazan unas nuevas (líneas o planos) normales a ellas, el volumen/área más pequeño encerrado por esas líneas/planos, es la celda de Wigner–Seitz. Figura 4, capítulo 1, de [2].

Mientras que la Primera Zona de Brillouin es la Celda de Wigner–Seitz en la red recíproca.

- (c) Para una red unidimensional, el conjunto de vectores de la base de la red Γ es de un único elemento. Por ende, la red unidimensional funciona como una recta numérica discreta, accediendo a todos los elementos de dicha recta mediante los valores de $m \in \mathbb{Z}$.
- (d) Para los planos (111), (110) se tiene la siguiente figura (primera y última imagen)

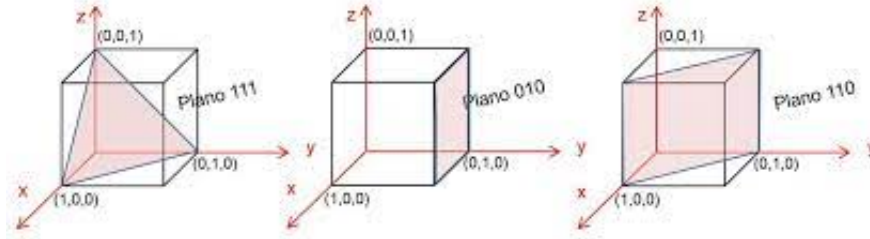


Figura 3: Planos en una red cúbica simple. Imagen extraída de [3].

Con esto podemos encontrar los vectores normales a cada uno de los planos (apuntando al primer octante). Los puntos de interés son

$$\begin{array}{ll} P_1 = (1, 0, 0) & Q_1 = (0, 1, 0) \\ P_2 = (0, 0, 1) & Q_2 = (0, 1, 1) \\ P_3 = (0, 1, 0) & Q_3 = (1, 0, 0) \end{array}$$

$$\begin{array}{ll} P_3P_1 = (-1, 1, 0) & Q_3Q_1 = (1, -1, 0) \\ P_2P_1 = (-1, 0, 1) & Q_2Q_1 = (0, 0, 1) \\ \downarrow & \downarrow \\ P_3P_1 \times P_2P_1 & Q_2Q_1 \times Q_3Q_1 \\ \downarrow & \downarrow \\ N_P = (1, 1, 1) & N_Q = (1, 1, 0), \end{array}$$

Con los vectores normales encontrados, utilizando el producto punto para encontrar el ángulo, se tiene

$$\theta = \arccos \frac{|N_P \cdot N_Q|}{|N_P||N_Q|} = 35.26^\circ.$$

- (e) Teniendo la forma de empaquetamiento atómico para una red *FCC*.



Figura 4: *FCC*.

Como se puede ver en la figura 4 el número de átomos por celda es $N_a = 6 * \frac{1}{2} + 8 * \frac{1}{8}$. El radio del átomo en términos del lado de cubo es $4R = \sqrt{2}a$, entonces el volumen del átomo es

$$V_a = \frac{\sqrt{2}}{24} \pi a^3;$$

por lo que, el factor de empaquetamiento atómico para una red *FCC* es

$$APF = N_a \frac{V_a}{V_c} = 4 * \frac{\frac{\sqrt{2}}{24} \pi a^3}{a^3} = \frac{1}{6} \sqrt{2} \pi = 0.74.$$

- (f) Tomando como idea el cálculo de la red recíproca de un *sc*, cuyos vectores recíprocos son $\mathbf{b}_1 = (2\pi/a)\hat{\mathbf{x}}$, $\mathbf{b}_2 = (2\pi/a)\hat{\mathbf{y}}$ y $\mathbf{b}_3 = (2\pi/a)\hat{\mathbf{z}}$; y, sabiendo que una red unidimensional es equivalente a un lado del cubo, entonces, dicha red existe y es de la forma $\mathbf{b} = (2\pi/a)\hat{\mathbf{u}}$. El hipervolumen de la primera zona de Brillouin es, en el caso de una dimensión, una longitud dada por los dos vectores más pequeños en la red, i.e. \mathbf{b} , $-\mathbf{b}$, cuyos bisectores son $-\frac{\pi}{a}$ y $\frac{\pi}{a}$; por lo que, el hipervolumen de la primera zona de Brillouin es $2\pi/a$.
- (g) El Hierro tiene una red cristalina centrada en el cuerpo (bcc), mientras que el Níquel presenta una red cristalina centrada en las caras (fcc). Entonces, encontrando la red recíproca del Hierro se tienen los vectores primitivos

$$a_1 = \frac{1}{2}a(-\hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{y}} + \hat{\mathbf{z}}), \quad a_2 = \frac{1}{2}a(\hat{\mathbf{x}} - \hat{\mathbf{y}} + \hat{\mathbf{z}}), \quad a_3 = \frac{1}{2}a(\hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{y}} - \hat{\mathbf{z}}).$$

Entonces, construimos los vectores de la red recíproca

$$b_1 = 2\pi \frac{a_2 \times a_3}{a_1 \cdot a_2 \times a_3}, \quad b_2 = 2\pi \frac{a_3 \times a_1}{a_1 \cdot a_2 \times a_3}, \quad b_3 = 2\pi \frac{a_1 \times a_2}{a_1 \cdot a_2 \times a_3}.$$

Con ayuda de *Mathematica* (función **Cross[]**) encontramos cada uno de los productos cruz

$$\begin{aligned} a_2 \times a_3 &= \frac{1}{2}a(\hat{\mathbf{y}} + \hat{\mathbf{z}}) \\ a_3 \times a_1 &= \frac{1}{2}a(\hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{z}}) \\ a_1 \times a_2 &= \frac{1}{2}a(\hat{\mathbf{y}} + \hat{\mathbf{y}}) \\ a_1 \cdot a_2 \times a_3 &= \frac{1}{2}a, \end{aligned}$$

entonces, sustituyendo en los vectores de la red recíproca se tiene

$$\begin{aligned} b_1 &= \frac{2\pi}{a}(\hat{\mathbf{y}} + \hat{\mathbf{z}}) \\ b_2 &= \frac{2\pi}{a}(\hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{z}}) \\ b_3 &= \frac{2\pi}{a}(\hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{y}}). \end{aligned}$$

Los cuales son equivalentes a los vectores primitivos para una red fcc, por ende a la red cristalina del Níquel.

(h)

Problema 2

- a) En el enunciado se expresa que cada par de vectores pertenecen a un plano distinto, por ende son linealmente independientes en sus planos y en general. Dado esto, representan una base y como son los vecinos más próximos, representan el conjunto de vectores primitivos de la red.
- b) Sabemos que los vectores no coplanares cumplen con la siguiente propiedad: $|(\hat{\mathbf{a}}_1 \times \hat{\mathbf{a}}_2) \cdot \hat{\mathbf{a}}_3| = 0$. Si los vectores son no coplanares son linealmente independientes; por ende, si el número de elementos de la lista es igual a la dimensión del espacio (como se muestra en el Parcial 1, problema 1c), representa una red de bravais. Y como estamos en espacios vectoriales, la cerradura bajo la suma es hereditaria.

Problema 3

Según el libro [1], el factor de forma atómica, lo podemos escribir como

$$f(k) = \frac{4\pi}{e} \int dr r^2 \rho(r) \frac{\sin kr}{kr},$$

reemplazando $\rho(r) = \frac{1}{\pi a_o^3} e^{-2r/a_o}$ se tiene

$$f(k) = \frac{4}{ke a_o^3} \underbrace{\int_0^\infty r \sin kre^{-2r/a_o} dr}_{\text{Utilizando Mathematica}} = \frac{4}{ke a_o^3} \left(\frac{4a_o^3 k}{(4 + k^2 a_o^2)^2} \right) = \frac{16}{e(4 + k^2 a_o^2)^2}.$$

Parcial 2

Problema 1

Para el oscilador armónico cuántico se tiene el hamiltoniano

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2, \quad (1)$$

también las relaciones adimensionales $Q^2 = m\omega q^2/\hbar$ y $P^2 = p^2/m\hbar\omega$. Los operadores q y p satisfacen $[q, p] = i\hbar$ y se tienen los operadores de creación y aniquilación

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(Q + iP), \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(Q - iP),$$

con el operador número definido como $N = a^\dagger a$.

- a) Dadas las relaciones adimensionales Q^2 y P^2 , se tienen de forma lineal $Q = \sqrt{m\omega/\hbar} q$ y $P = 1/\sqrt{m\omega\hbar} p$, entonces, el conmutador $[Q, P]$ es

$$[Q, P] = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \sqrt{\frac{1}{m\omega\hbar}} \underbrace{[q, p]}_{i\hbar} = \boxed{i\hbar}.$$

- b) Para el conmutador entre los operadores de creación y aniquilación se tiene

$$[a, a^\dagger] = \frac{1}{2}([Q, Q] + i[P, Q] - i[Q, P] + [P, P]) = \frac{1}{2}(1 + 1) = \boxed{1}.$$

- c) El hamiltoniano en terminos de las relaciones adimensionales es

$$H = \frac{\hbar\omega}{2}(P^2 + Q^2),$$

y, utilizando mathematica (para facilitar los cálculos), los operadores Q, P en términos de los operadores aniquilación y creación, son

$$Q = \frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^\dagger), \quad P = -\frac{i}{\sqrt{2}}(a - a^\dagger).$$

Entonces

$$Q^2 = \frac{1}{2}(a^2 + a^{\dagger 2} + aa^\dagger + a^\dagger a), \quad P^2 = -\frac{1}{2}(a^2 + a^{\dagger 2} - aa^\dagger - a^\dagger a).$$

Sustituyendo en el hamiltoniano encontrado este inciso

$$H = \boxed{\frac{\hbar\omega}{2}(aa^\dagger + a^\dagger a)}.$$

- d) Para este inciso, utilizamos la siguiente propiedad de los conmutadores $[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$, entonces

$$[N, a] = a^\dagger[a, a] + \underbrace{[a^\dagger, a]}_{-1}a = \boxed{-a}.$$

$$[N, a^\dagger] = a^\dagger[a, a^\dagger] + [a^\dagger, a^\dagger]a = \boxed{-a^\dagger}.$$

Problema 2

El estudio de los fonones abarca una parte importante en la física de estado sólido. Los fonones son una versión mecano-cuántica de los modos normales, es decir, es una onda que se propaga por la red de un cristal, la cuál puede describirse bajo la idea de un paquete de energía (cuánto).

Para el desarrollo posterior, se utilizará una red bidimensional con planos paralelos que permiten ondas longitudinales o transversales. Asumiremos que la fuerza en el plano s causada por el desplazamiento del plano $s + p$ es proporcional a la diferencia de sus desplazamientos. Tomaremos únicamente los primeros vecinos, i.e. $p = \pm 1$. Entonces la ecuación de movimiento es

$$F_s = M\ddot{u}_s = C(u_{s+1} - u_s) + C(u_{s-1} - u_s) = C(u_{s+1} + u_{s-1} - 2u_s), \quad (2)$$

con C es la constante de fuerza. Nos enfocaremos en soluciones relacionadas con un oscilador armónico, es decir

$$-M\omega^2 u_s = C(u_{s+1} + u_{s-1} - 2u_s).$$

Con esta relación, podemos plantear que las soluciones en $u_{s\pm 1}$ en términos de la separación entre planos y del vector de onda

$$u_{s\pm 1} = ue^{isKa}e^{\pm iKa}.$$

Sustituyendo lo anterior en 2 y simplificando, se llega a la relación de dispersión $\omega(K)$

$$\omega^2 = \frac{2C}{M}(1 - \cos Ka).$$

Para lo cuál, la primera zona de Brillouin está en $-\pi/a \leq K \leq \pi/a$ y

$$\frac{d\omega}{dK} = \frac{2Ca}{M} \sin Ka = 0,$$

con esto, se redujo el problema a uno de osciladores donde sus celdas interactúan con sus primeros vecinos.

Como se mencionó al inicio, los fonones son una cuantización de los modos normales, entonces la energía está dada como

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega.$$

En la cuál, la energía base es $\frac{1}{2}\hbar\omega$, esto es equivalente tanto para fotones como para phonones, dada su relación con el oscilador armónico. La cuantización del fonón surge al cambiar las variables clásicas por su respectiva variable cuántica, como en el hamiltoniano¹

$$H = \sum_{s=1}^n \left[\frac{1}{2M}p_s^2 + \frac{1}{2}C(q_{s+1} - q_s)^2 \right].$$

Aunque los fonones pueden interactuar con fotones, neutrones, electrones, etc. estos no tienen una cantidad de momento física. Dado esto, nos quedamos con la forma del hamiltoniano y la respectiva forma de la energía cuantizada del fonón.

Problema 3

La energía cinética individual está dada como $\frac{1}{2}M\dot{u}_s^2$, y la fuerza entre los átomos contiguos de la red tiene la forma de la ley de Hooke $-C(u_s - u_{s+1})$ (solo tomando el estiramiento). Su potencial está dado por $\frac{1}{2}C(u_s - u_{s+1})^2$, esto se extiende a toda la red. Con esto, la energía total está dada por

$$E = \frac{1}{2}M\dot{u}_s^2 + \frac{1}{2}C(u_s - u_{s+1})^2.$$

Para encontrar la energía potencial y cinética promediada en el tiempo partimos de sustituir en la energía potencial la función u_s , entonces se tiene

$$\begin{aligned} u_s - u_{s+1} &= u \cos(\omega t - ska) - u \cos(\omega t - (s+1)ka) \\ &= u \cos(\omega t - ska) - [u \cos(\omega t - ska) \cos ka - u \sin(\omega t - ska) \sin ka] \\ (u_s - u_{s+1})^2 &= u^2 \cos^2(\omega t - ska)(1 - \cos ka)^2 + u^2 \sin^2(\omega t - ska) \sin^2 ka \\ &\quad - 2u^2 \cos(\omega t - ska) \sin(\omega t - ska)(1 - \cos ka) \sin ka, \end{aligned}$$

¹ecuación extraída del Apéndice C de [2].

sabiendo que $\langle \sin^2 x \rangle + \langle \cos^2 x \rangle = \langle 1 \rangle = 1$ y como para el seno y coseno este valor esperado debe ser igual, entonces $\langle \sin^2 x \rangle = \langle \cos^2 x \rangle = \frac{1}{2}$; además, $\langle \sin x \cos x \rangle = 0$. Con esto, calculamos el valor esperado de la energía potencial

$$\langle V \rangle = \frac{1}{2}u^2(1 - \cos ka)^2 + \frac{1}{2}u^2 \sin^2 ka = u^2(1 - \cos ka).$$

Integrando la relación de dispersión dada en el intervalo de $0 \rightarrow k$

$$\omega^2 = \int_0^k \frac{2Ca}{M} \sin ka \, dk = \frac{2C}{M}(1 - \cos ka),$$

sustituyendo en el valor esperado de la energía potencial

$$\langle V \rangle = \frac{1}{4}M\omega^2 u^2.$$

Para la energía cinética, derivamos u_s respecto al tiempo $\dot{u}_s = -u\omega \sin(\omega t - ska)$, entonces

$$\begin{aligned} \langle \dot{u}_s^2 \rangle &= u^2 \omega^2 \sin^2(\omega t - ska) = \frac{1}{2}u^2 \omega^2 \\ \langle T \rangle &= \frac{1}{4}M\omega^2 u^2, \end{aligned}$$

entonces

$$\langle E \rangle = \langle T \rangle + \langle V \rangle = \frac{1}{2}M\omega^2 u^2.$$

Problema 4

Dado que el potencial es continuo con infinitas derivadas, se cumple el teorema de Taylor. En concreto, podemos escribir el potencial como una serie de Maclaurin (porque es alrededor del cero)

$$V(r) = V(0) + \frac{V'(0)}{1!}r + \frac{V''(0)}{2!}r^2 \dots,$$

tomando $V(0) = V'(0) = 0$ y $r \ll 0$; de modo que

$$V(r) = \frac{V''(0)}{2}r^2.$$

Donde el error esta dado por

$$\text{Error} = \left| \frac{V^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} r^{n+1} \right|,$$

con $\xi \in (0, r)$.

Examen Final

Problema 1

Problema 2

En el modelo de Drude, la probabilidad de que un electrón colisione en un intervalo infinitesimal de tiempo dt está dada por $\frac{dt}{\tau}$, donde τ es el intervalo de relajación.

1. Primero, tomaremos un intervalo Δt de la forma $\Delta = \frac{t}{N}$, teniendo en cuenta que $\lim_{N \rightarrow \infty} \Delta t = dt$. Entonces, para la partícula no colisiona con una probabilidad $1 - \Delta t/\tau$; por lo tanto, la probabilidad de no colisionar en un intervalo $[0, t]$ esta dado por el producto de las N probabilidades independientes, i.e.

$$p(t) = \left(1 - \frac{\Delta t}{\tau}\right) \cdots \left(1 - \frac{\Delta t}{\tau}\right) = \left(1 - \frac{\Delta t}{\tau}\right)^N,$$

reemplazando Δt y tomando el límite cuando $N \rightarrow \infty$

$$p(t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{t/\tau}{N}\right)^N = e^{-t/\tau}.$$

2.

3. Para esto, podemos tomar la probabilidad de que un electrón cualquiera no colisione en un intervalo $[0, t]$ y luego la de colisionar en el siguiente intervalo dt , por ende la probabilidad total es el producto de ambas

$$= \left(\frac{dt}{\tau}\right) e^{-t/\tau}.$$

4. El tiempo medio lo podemos encontrar de la siguiente forma

$$\langle t \rangle = \frac{1}{\tau} \int_0^\infty t p(t) dt$$

Utilizando la siguiente línea de *Mathematica*: `Integrate[1/a*t*Exp[-t/a], t, 0, Infinity]`, se tiene que

$$\langle t \rangle = \tau.$$

5. Por lo mismo realizado en el inciso anterior, el tiempo medio entre las colisiones es exactamente el mismo que el tiempo medio desde la última colision, τ .

6.

Problema 3

En la teoría cuántica del sólido armónico encontramos que el calor específico² no es una constante, que está dado por una sumatoria sobre los vectores de onda

$$c_v = \frac{1}{V} \sum_k \frac{\partial}{\partial T} \frac{\hbar \omega_s(k)}{e^{\beta \hbar \omega_s(k)} - 1}, \quad (3)$$

la que claramente depende del espectro de frecuencias de los modos normales.

En el caso de que la relación $k_B T / \hbar$ es muy grande comparada con las frecuencias de los fonones, el denominador de (3) se puede expandir por medio de series de Taylor y realizando la sumatoria, llegamos a la ecuación clásica conocida $c_v = 3Nk_B/V$ (Ley de Dulong–Petit). Si llamamos c_v^o al calor específico dado por dicha ley, entonces

$$c_v = c_v^o \Delta c_v;$$

por lo tanto,

$$\frac{\Delta c_v}{c_v^o} = - \frac{\hbar^2}{12(k_B T)^2 * 3N} \sum \omega_s(k)^2.$$

²Ecuación extraída de [3].

Para temperaturas lo suficientemente altas, las correcciones a lo clásico empiezan a ser significantes. Para bajas temperaturas, se estudia el límite en un cristal grande, para el cuál la suma en (3) se vuelve densa en la escala para sustituirla por una integral. (Para todo par de vectores que cumplan las condiciones de frontera de Born-von Karman)

$$c_v = \frac{\partial}{\partial T} \sum_s \int \frac{dk}{(2\pi)^3} \frac{\hbar\omega_s(k)}{e^{\hbar\omega_s(k)/k_B T} - 1}, \quad (4)$$

donde la integral debe ser tomada en la primera zona de Brillouin.

Referencias

- [1] Baake, M., & Grimm, U. (2013). *Aperiodic order (Vol. 1)*. Cambridge University Press.
- [2] McEuen, P., & Kittel, C. (2005). *Introduction to solid state physics*.
- [3] Ashcroft, N. W. (1976). *Solid State Physics* (HR&W) Google Scholar NW Ashcroft and ND Mermin 1979. Solid State Physics, 1, 2.
- [4] Baake, M., & Grimm, U. (2013). *Aperiodic order (Vol. 1)*. Cambridge University Press.
- [5] Anderson, P. W. (1984). *Basic notions of condensed matter physics*. Frontiers in physics, 55, 49.
- [6] UNIVERSIDAD DEL PAÍS VASCO / EUSKAL HERRIKO UNIBERTSITATEA ESCUELA DE INGENIERÍA DE BILBAO / BILBOKO INGENIERITZA ESKOLA. (s/f). Ehu.eus. Recuperado el 26 de noviembre de 2022, de https://ocw.ehu.eus/pluginfile.php/51169/mod_resource/content/0/Tema%203-Estructura%20cristalina.pdf