Tarea 5

Entrega: 4 de diciembre de 2023

Problema 1: Cadena monoatómica con acoplamiento entre segundos vecinos

Considera una cadena unidimensional de átomos idénticos de masa m. Cada átomo está unido con su vecino a través de un resorte de constante κ_1. Considera además que cada átomo también está conectado con su segundo vecino por medio de un segundo resorte de constante κ_2, como se ilustra en la figura 1.

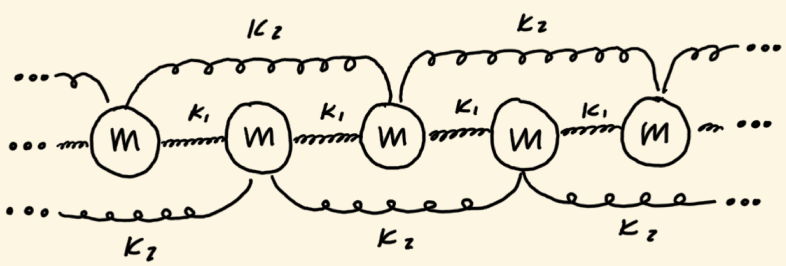

Figura 1: Cadena monoatómica con acoplamiento entre primeros y segundos vecinos.

(a) (Valor: 2.5pt) - Muestra que la ecuación de movimiento asociada al desplazamiento δx_n, de la n-ésima masa es:

$$m\,\delta\ddot{x}_n = \kappa_1(\delta x_{n+1} - \delta x_n) + \kappa_1(\delta x_{n-1} - \delta x_n) + \kappa_2(\delta x_{n+2} - \delta x_n) + \kappa_2(\delta x_{n-2} - \delta x_n)$$

Solución

Sabemos que la energía potencial de la cadena está dada por:

$$V_{\text{tot}} = \sum_i \frac{\kappa}{2}(\delta x_{i+1} - \delta x_i)^2,$$

esto para cada una de las constantes de los resortes.

Así,

$$V_{\text{tot}} = \frac{\kappa_1}{2}\left[(\delta x_{n+1} - \delta x_n)^2 + (\delta x_n - \delta x_{n-1})^2\right] + \frac{\kappa_2}{2}\left[(\delta x_{n+2} - \delta x_n)^2 + (\delta x_n - \delta x_{n-2})^2\right]$$

La fuerza sobre la n-ésima masa está dada como

$$F_n = -\frac{\partial V_{\text{tot}}}{\partial x_n} = -\frac{\kappa_1}{2}\left[2(\delta x_{n+1} - \delta x_n)\cdot(-1) + 2(\delta x_n - \delta x_{n-1})\right]$$
$$-\frac{\kappa_2}{2}\left[2(\delta x_{n+2} - \delta x_n)\cdot(-1) + 2(\delta x_n - \delta x_{n-2})\right],$$
$$F_n = \kappa_1(\delta x_{n+1} - \delta x_n) + \kappa_1(\delta x_{n-1} - \delta x_n) + \kappa_2(\delta x_{n+1} - \delta x_n) + \kappa_2(\delta x_{n-2} - \delta x_n).$$

Y $F = ma = m\frac{\mathrm{d}^2 x}{\mathrm{d}t^2}$, entonces

$$\boxed{m\,\delta\ddot{x}_n = \kappa_1(\delta x_{n+1} - \delta x_n) + \kappa_1(\delta x_{n-1} - \delta x_n) + \kappa_2(\delta x_{n+2} - \delta x_n) + \kappa_2(\delta x_{n-2} - \delta x_n).} \tag{1.1}$$

(b) (Valor: 2.5pt) - Usando el resultado del inciso anterior, demuestra que la relación de dispersión $\omega(k)$ para este modelo está dada por:

$$\omega(k) = \sqrt{\frac{2\kappa_1}{m}(1-\cos(ka)) + \frac{2\kappa_2}{m}(1-\cos(2ka))}$$

en donde a es la constante de la red (es decir, la separación entre átomos).

Solución

Buscamos soluciones para los modos normales. Tenemos el ansatz,

$$\delta x_n = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t - \mathrm{i}kna}.$$

Sustituimos en (1.1),

$$-m\omega^2 A\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t - \mathrm{i}kna} = \kappa_1\left(A\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t - \mathrm{i}k(n+1)a} - A\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t - \mathrm{i}kna}\right) + \kappa_1\left(A\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t - \mathrm{i}k(n-1)a} - A\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t - \mathrm{i}kna}\right)$$
$$+\kappa_2\left(A\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t - \mathrm{i}k(n+2)a} - A\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t - \mathrm{i}kna}\right) + \kappa_2\left(A\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t - \mathrm{i}k(n-2)a} - A\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t - \mathrm{i}kna}\right),$$
$$= A\kappa_1\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\left[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kna}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kna} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kna}\mathrm{e}^{+\mathrm{i}ka} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kna}\right],$$
$$+A\kappa_2\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\left[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kna}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2ka} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kna} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kna}\mathrm{e}^{+\mathrm{i}2ka} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kna}\right],$$
$$= A\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t - \mathrm{i}kna}\left[\kappa_1(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka} + \mathrm{e}^{\mathrm{i}ka} - 2) + \kappa_2(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2ka} + \mathrm{e}^{\mathrm{i}2ka} - 2)\right].$$

Usamos que $\cos(x) = \frac{1}{2}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}x} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}x})$,

$$\implies = A\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t - \mathrm{i}kna}\left[k_1(2\cos(x) - 2) + \kappa_2(2\cos(2ka) - 2)\right] = -m\omega^2 A\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t - \mathrm{i}kna},$$
$$m\omega^2 = 2\kappa_1(1-\cos(ka)) + 2\kappa_2(1-\cos(2ka)).$$

Por lo que la relación de dispersión es

$$\boxed{\omega(k) = \sqrt{\frac{2\kappa_1}{m}(1-\cos(ka)) + \frac{2\kappa_2}{m}(1-\cos(2ka))}.} \tag{1.2}$$

(c) (Valor: 2.5pt) - Grafica esta relación de dispersión dentro de la primera zona de Brillouin.

Al intervalo $-\frac{\pi}{a} \leq k \leq \frac{\pi}{a}$ se conoce como la primera zona de Brillouin. Para graficar la relación de dispersión (1.2) se usaron los siguientes parámetros: $\kappa_1 = 100$, $\kappa_2 = 1$, $m = 1$, $a = 1$. La gráfica se muestra en la figura 2.

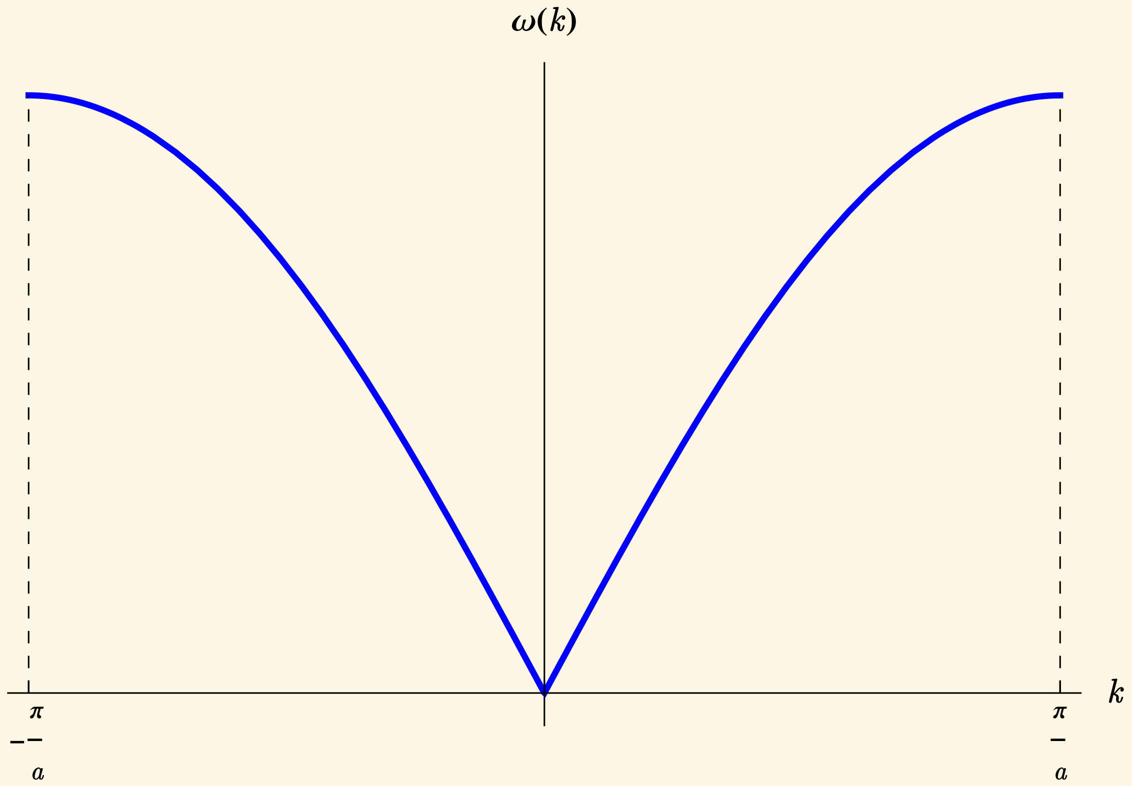

Figura 2: Relación de dispersión $\omega(k)$ en la primera zona de Brillouin.

(d) (Valor: 2.5pt) - Usando el resultado del inciso (b), demuestra que la velocidad del sonido está dada por:

$$v_s = a\sqrt{\frac{\kappa_1 + 4\kappa_2}{m}}$$

Solución

Para las ondas sonoras $\omega_s(k) \propto k$,

$$\omega_s(k) = v_s k,$$

para k pequeña.

Recordamos además que

$$2\sin^2\left(\frac{x}{2}\right) = 1 - \cos(x).$$

Así, (1.2) queda como:

$$\omega(k) = \sqrt{\frac{4\kappa_1}{m}\sin^2\left(\frac{ka}{2}\right) + \frac{4\kappa_2}{m}\sin^2(ka)}.$$

Usando que $\sin(x) \simeq x$ para x pequeña.

$$\begin{aligned}
\omega(k) &\simeq \sqrt{\frac{4\kappa_1}{m}\left(\frac{ka}{2}\right)^2 + \frac{4\kappa_2}{m}(ka)^2}, \\
&= \sqrt{(ka)^2\left(\frac{k_1 + 4\kappa_2}{m}\right)}, \\
\implies \omega(k) &= a\sqrt{\frac{\kappa_1 + 4\kappa_2}{m}}k.
\end{aligned}$$

Por lo que la velocidad del sonido es

$$\boxed{v_s = a\sqrt{\frac{\kappa_1 + 4\kappa_2}{m}}.}$$

Problema 2: Extra: Velocidades en el Modelo de Electrones Libres

Considera un metal en donde los electrones de conducción son descritos por el modelo de electrones libres. Recordemos que en este modelo, la velocidad promedio de los electrones en la superficie de Fermi está dada por la velocidad de Fermi $v_F = \hbar k_F/m$, en donde k_F es el vector de onda de Fermi.

(a) (Valor: +1pt) - Usando los resultados obtenidos en clase, demuestra que la **velocidad de arrastre** de un electrón en presencia de un campo eléctrico $\vec{E}$ está dada por

$$\vec{v}_a = -\frac{\sigma\vec{E}}{ne} \tag{2.1}$$

en donde σ es la conductividad eléctrica. Demuestra también que σ en términos del camino libre medio ℓ está dada por

$$\sigma = \frac{ne^2\ell}{mv_F}. \tag{2.2}$$

Solución

Sabemos que la densidad de corriente está dada en términos de la velocidad de arrastre como

$$\vec{J} = -n\mathrm{e}\vec{v}_a. \tag{2.3}$$

Y, por la ley de Ohm, tenemos que $\vec{J} \propto \vec{E}$, *i.e.*,

$$\vec{J} = \sigma\vec{E}, \tag{2.4}$$

Igualando estas expresiones y resolviendo para $\vec{v}_a$,

$$-n\mathrm{e}\vec{v}_a = \sigma\vec{E},$$

$$\boxed{\vec{v}_a = -\frac{\sigma\vec{E}}{n\mathrm{e}}.}$$

Por otro lado, en clase se obtuvo que la velocidad de arrastre para un electrón con momento $\vec{p}$ es

$$\vec{v}_a = \frac{-\mathrm{e}E\tau}{m}, \tag{2.5}$$

con τ el tiempo de relajación.

Sustituyendo (2.5) en (2.3), la densidad de corriente queda como

$$\vec{J} = -n\mathrm{e}\left(\frac{-\mathrm{e}\vec{E}\tau}{m}\right),$$

$$\vec{J} = \frac{n\mathrm{e}^2\tau}{m}\vec{E}.$$

Y comparando su magnitud con la de (2.4), vemos que

$$\boxed{\sigma = \frac{n\mathrm{e}^2\tau}{m}.}$$

Sabemos además que la velocidad típica de un electrón es v_F por lo que el camino libre medio es

$$\ell = v_F\tau,$$

$$\implies \tau = \frac{\ell}{v_F}.$$

Por lo tanto,

$$\boxed{\sigma = \frac{n\mathrm{e}^2\ell}{mv_F}.}$$

(b) (Valor: +1pt) - Considera un alambre hecho de cobre:

(b.1) Calcula el valor de v_a y de v_F suponiendo que la temperatura del alambre es de 300 K y se le aplica un campo eléctrico cuya magnitud es $E = 1\,\mathrm{V/m}$. Comenta sobre cómo se comparan ambas velocidades.

Solución

Recordamos que la velocidad de Fermi v_F está dada como

$$v_F = \frac{\hbar k_F}{m}, \tag{2.6}$$

con $k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$ el vector de onda de Fermi.

Por un lado, de (2.1) tenemos que la magnitud de la velocidad de arrastre v_a es

$$v_a = \frac{\sigma E}{n\mathrm{e}} = \frac{(5.9\times10^7\,\Omega^{-1}\cdot\mathrm{m}^{-1})(1\,\mathrm{V/m})}{(8.45\times10^{28}\,\text{átomos/m}^3)(1.6\times10^{-19}\,\mathrm{C})},$$

$$\boxed{v_a \simeq 4.36\times10^{-3}\,\mathrm{m/s}.}$$

Mientras que de (2.6), la velocidad de Fermi v_F es

$$\begin{aligned} v_F &= \frac{\hbar}{m}\left(3\pi^2 n\right)^{1/3}, \qquad (2.7) \\ &= \frac{1.054\times10^{-34}\,\mathrm{J\cdot s}}{9.109\times10^{-31}\,\mathrm{kg}}\cdot\left(3\pi^2(8.45\times10^{28}\,\text{átomos/m}^3)\right)^{1/3}, \end{aligned}$$

$$\boxed{v_F = 1.57\times10^{6}\,\mathrm{m/s}.} \qquad (2.8)$$

Si comparamos la velocidad de arrastre con la velocidad de Fermi notaremos que esta última es 9 ordenes de magnitud mayor.

(b.2) ¿Qué magnitud tendría que tener dicho campo eléctrico para que v_a y v_F fueran iguales? Escribe tu resultado en unidades de V/m.

Solución

Para determinar la magnitud de E igualamos (2.1) con (2.6) y resolvemos para éste,

$$\begin{aligned} \frac{\sigma E}{n\mathrm{e}} &= v_F, \\ E &= v_F\frac{n\mathrm{e}}{\sigma}. \end{aligned}$$

Tal que

$$E = (1.57\times10^{6}\,\mathrm{m/s})\frac{(8.45\times10^{28}\,\text{átomos/m}^3)(1.6\times10^{-19}\,\mathrm{C})}{5.9\times10^{7}\,\Omega^{-1}\cdot\mathrm{m}^{-1}},$$

$$\boxed{E \simeq 3.59\times10^{8}\,\mathrm{V/m}.}$$

(b.3) Estima el valor del camino libre medio ℓ para el cobre a 300 K y compara este valor con el espaciamiento promedio de los átomos del metal.

Solución

De (2.2) sabemos que el valor del camino libre medio ℓ está dado por

$$\ell = v_F\frac{\sigma m}{n\mathrm{e}^2}.$$

Tal que,

$$\ell = (1.57\times10^{6}\,\mathrm{m/s})\frac{(5.9\times10^{7}\,\Omega^{-1}\cdot\mathrm{m}^{-1})(9.109\times10^{-31}\,\mathrm{kg})}{(8.45\times10^{28}\,\text{átomos/m}^3)(1.6\times10^{-19}\,\mathrm{C})^2},$$

$$\boxed{\ell \simeq 3.9\times10^{-8}\,\mathrm{m} = 390\,\text{Å}.}$$

Recordamos que el valor de espaciamiento promedio entre los átomos a temperatura ambiente es de 400 Å, por lo que el valor de ℓ que se obtuvo para el cobre a temperatura ambiente es prácticamente el mismo.

Información útil para resolver este problema: el cobre es un metal monovalente, lo que significa que hay un electrón libre por cada átomo (o sea, cada átomo del metal dona un electrón de conducción). La densidad de átomo del cobre es $n = 8.45\times10^{28}$ átomos/m^3. La conductividad eléctrica del cobre a 300 K es $\sigma = 5.9\times10^{7}\,\Omega^{-1}\cdot\mathrm{m}^{-1}$