

Tarea 10: Física Atómica y Materia Condensada

Tomás Ricardo Basile Álvarez
316617194

May 24, 2022

Problema 1

Demostrar que $|\vec{a}_3|/|\vec{a}_1| = (8/3)^{1/2}$ para el caso ideal de empaquetamiento compacto hexagonal.

En la clase (ecuación 11.5 de las notas) vimos que los vectores de una red de empaquetamiento compacto hexagonal son:

$$\begin{aligned}\vec{a}_1 &= (2, 0, 0) \\ \vec{a}_2 &= (1, \sqrt{3}, 0) \\ \vec{a}_3 &= \left(0, 0, 4\sqrt{\frac{2}{3}}\right)\end{aligned}$$

Como en clase no hicimos la deducción completa de estos vectores, vamos ahora a comprobar que efectivamente son los vectores para el empaquetamiento hexagonal. Para hacerlo, primero recordamos que el empaquetamiento hexagonal se define haciendo primero una capa de esferas A y poniendo encima una capa de esferas B como se ve en la figura 11.5 de las notas:

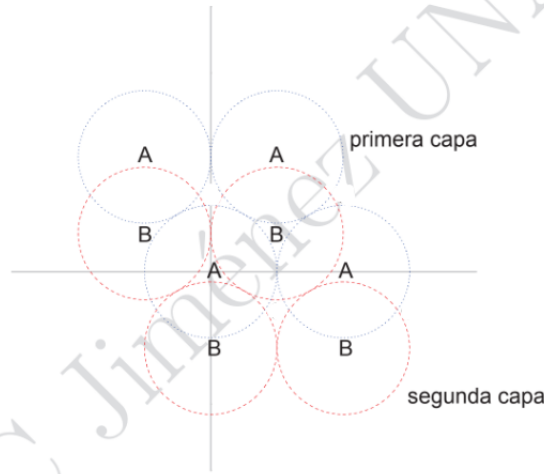


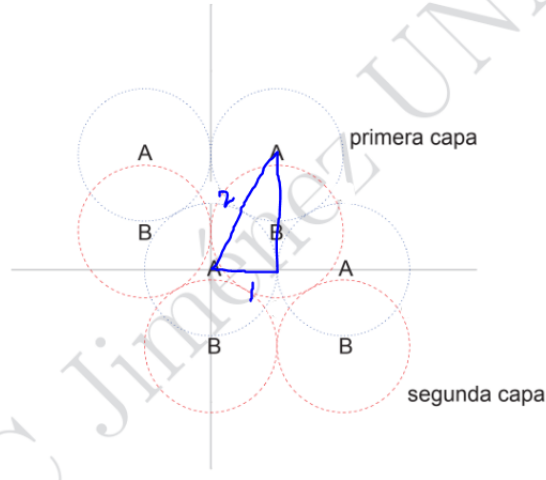
Figure 1: Figura 11.5 de las notas.

Luego, los vectores $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ que se proponen pueden ser aquéllos que unen al origen (en el que se encuentra una esfera A) con 3 de las esferas A ubicadas en direcciones que sean linealmente independientes.

El primer vector puede ser el que une al origen con la esfera A que se encuentra a la derecha. Vemos que esta esfera tiene coordenadas $(2, 0, 0)$, ya que se encuentra en el eje x y al ser tangente a la esfera del origen,

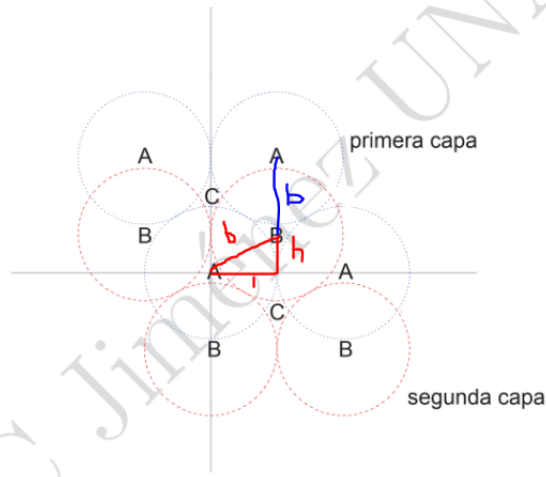
se puede ver que está a una distancia de dos radios. Por lo tanto, $\vec{a}_1 = (2, 0, 0)$.

Por otro lado, el segundo vector puede ser el que une al origen con la esfera A que está en la parte superior derecha de la figura 11.5. Para encontrar el vector que las conecta, podemos trazar el triángulo que se ve en la siguiente figura:



Queda claro que este triángulo es rectángulo y el lado horizontal tiene una longitud de 1, mientras que la hipotenusa mide 2. Por lo tanto, su lado vertical tiene una longitud de $\sqrt{2^2 - 1^2} = \sqrt{3}$. Entonces, la posición de la esfera se encuentra desplazada horizontalmente una distancia 1 del origen y verticalmente una distancia $\sqrt{3}$, por lo que el segundo vector es $\vec{a}_2 = (1, \sqrt{3}, 0)$.

Finalmente, el tercer vector se puede conseguir uniendo el origen con la esfera A que se encuentra arriba del origen en la dirección z (dos capas encima). Para calcular este vector, necesitamos obtener la distancia que hay entre dos capas. Para hacerlo, podemos empezar calculando la posición de la esfera B de la figura 11.5 y su coordenada z nos dará la distancia vertical entre capas. Calcular este vector se puede hacer con la siguiente figura:



En la figura se aprecia que el centro de B tiene una coordenada x de 1 y llamamos h a su coordenada y . Además, llamamos b a la distancia entre el origen y la proyección de la posición de la esfera B al plano xy . Esta distancia marcada en rojo es la misma que se marca en azul con respecto a la otra esfera A por simetría. Por lo tanto, vemos que la coordenada en y de la esfera A es de $h + b$, pero en el paso anterior vimos que esta coordenada era $\sqrt{3}$, por lo que $h + b = \sqrt{3} \Rightarrow b = \sqrt{3} - h$.

Por otro lado, como el triángulo rojo es rectangular, se cumple que $1^2 + h^2 = b^2 \Rightarrow 1 + h^2 = b^2$ y si sustituimos $b = \sqrt{3} - h$, nos queda $1 + h^2 = (\sqrt{3} - h)^2 \Rightarrow 1 + h^2 = 3 - 2\sqrt{3}h + h^2 \Rightarrow 1 = 3 - 2\sqrt{3}h \Rightarrow h = \frac{1}{\sqrt{3}}$. Es decir, B tiene una coordenada y de $1/\sqrt{3}$.

Finalmente, digamos que la coordenada z de B es z_B , y como la distancia del origen a la esfera B debe de ser 2 (porque es tangente a la esfera del origen), se cumple que $x_B^2 + y_B^2 + z_B^2 = 4 \Rightarrow (1)^2 + (1/\sqrt{3})^2 + z_B^2 = 4 \Rightarrow 1 + 1/3 + z_B^2 = 4 \Rightarrow z_B = 2\sqrt{2/3}$. Es decir, la distancia vertical entre dos capas es de $2\sqrt{2/3}$.

Por lo tanto, la esfera A que se encuentra dos capas arriba del origen tiene coordenadas $\vec{a}_3 = (0, 0, 4\sqrt{2/3})$.

con esto se prueba que los vectores son efectivamente los que se encuentran en la ecuación 11.5 de las notas. Entonces, podemos calcular directamente las normas de los vectores \vec{a}_1, \vec{a}_3 :

$$|\vec{a}_1| = \sqrt{2^2 + 0^2 + 0^2} = \sqrt{2^2} = 2$$

$$|\vec{a}_3| = \sqrt{0^2 + 0^2 + \left(4\sqrt{\frac{2}{3}}\right)^2} = \sqrt{16 \cdot \frac{2}{3}} = \sqrt{\frac{32}{3}}$$

Por lo tanto, concluimos que:

$$\frac{|\vec{a}_3|}{|\vec{a}_1|} = \frac{\sqrt{\frac{32}{3}}}{2} = \sqrt{\frac{32}{3 \cdot 4}} = \boxed{\sqrt{\frac{8}{3}}}$$

Problema 2

Demostrar que la matriz

$$R = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2/3} & 1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{6} & 1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{6} & -1/\sqrt{3} \end{pmatrix}$$

es ortogonal y demostrar que al multiplicarla por los vectores

$$\begin{aligned} \vec{a}_1 &= (2, 0, 0) \\ \vec{a}_2 &= (1, \sqrt{3}, 0) \\ \vec{a}_3 &= \left(1, \frac{1}{\sqrt{3}}, 2\sqrt{\frac{2}{3}}\right) \end{aligned}$$

se obtiene la nueva base

$$\begin{aligned} \vec{a}_1 &= (0, \sqrt{2}, \sqrt{2}) \\ \vec{a}_2 &= (\sqrt{2}, 0, \sqrt{2}) \\ \vec{a}_3 &= (\sqrt{2}, \sqrt{2}, 0) \end{aligned}$$

Que una matriz sea ortogonal significa que $RR^T = I$ (donde R^T es la matriz transpuesta). Entonces, podemos calcular directamente este producto y comprobar que obtenemos la identidad, para así concluir que R es ortogonal:

$$\begin{aligned} RR^T &= \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2/3} & 1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{6} & 1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{6} & -1/\sqrt{3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2/3} & 1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{6} & 1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{6} & -1/\sqrt{3} \end{pmatrix}^T \\ &= \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2/3} & 1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{6} & 1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{6} & -1/\sqrt{3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ \sqrt{2/3} & -1/\sqrt{6} & 1/\sqrt{6} \\ 1/\sqrt{3} & 1/\sqrt{3} & -1/\sqrt{3} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 + \sqrt{2/3}\sqrt{2/3} + 1/\sqrt{3}(1/\sqrt{3}) & 0 + \sqrt{2/3}(-1/\sqrt{6}) + 1/\sqrt{3}(1/\sqrt{3}) & 0 + \sqrt{2/3}(1/\sqrt{6}) + 1/\sqrt{3}(-1/\sqrt{3}) \\ 0 + (-\sqrt{1/6})\sqrt{2/3} + 1/\sqrt{3}(1/\sqrt{3}) & 1/\sqrt{2}(1/\sqrt{2}) + (-\sqrt{1/6})(-1/\sqrt{6}) + 1/\sqrt{3}(1/\sqrt{3}) & 1/\sqrt{2}(1/\sqrt{2}) + (-1/\sqrt{6})(1/\sqrt{6}) + 1/\sqrt{3}(-1/\sqrt{3}) \\ 0 + (\sqrt{1/6})\sqrt{2/3} + (-1/\sqrt{3})(1/\sqrt{3}) & 1/\sqrt{2}(1/\sqrt{2}) + \sqrt{1/6}(-1/\sqrt{6}) + (-1/\sqrt{3})1/\sqrt{3} & 1/\sqrt{2}(1/\sqrt{2}) + 1/\sqrt{6}(1/\sqrt{6}) + (-1/\sqrt{3})(-1/\sqrt{3}) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 + 2/3 + 1/3 & 0 - \sqrt{1/9} + \sqrt{1/9} & 0 + \sqrt{1/9} - \sqrt{1/9} \\ 0 - \sqrt{1/9} + \sqrt{1/9} & 1/2 + 1/6 + 1/3 & 1/2 - 1/6 - 1/3 \\ 0 + \sqrt{1/9} - \sqrt{1/9} & 1/2 - 1/6 - 1/3 & 1/2 + 1/6 + 1/3 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Por lo tanto, probamos que $RR^T = I$, lo que significa que la matriz es ortogonal.

Ahora veremos que al aplicar la matriz a los vectores $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ se obtienen los $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$. Para hacerlo, simplemente hacemos el producto de la matriz por cada uno de los vectores:

- \vec{a}_1 :

$$R\vec{a}_1 = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2/3} & 1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{6} & 1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{6} & -1/\sqrt{3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 + 0 + 0 \\ 2(1/\sqrt{2}) + 0 + 0 \\ 2(1/\sqrt{2}) + 0 + 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \sqrt{2} \\ \sqrt{2} \end{pmatrix} = \vec{a}_1$$

- \vec{a}'_2 :

$$\begin{aligned}
Ra\vec{a}'_2 &= \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2/3} & 1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{6} & 1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{6} & -1/\sqrt{3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{3} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 + \sqrt{2/3}\sqrt{3} + 0 \\ 1/\sqrt{2}(1) - 1/\sqrt{6}\sqrt{3} + 0 \\ 1/\sqrt{2}(1) + 1/\sqrt{6}(\sqrt{3}) + 0 \end{pmatrix} = \\
&= \begin{pmatrix} \sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} - 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} + 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{2} \\ 0 \\ 2/\sqrt{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{2} \\ 0 \\ \sqrt{2} \end{pmatrix} = \vec{a}_2
\end{aligned}$$

- \vec{a}'_3 :

$$\begin{aligned}
Ra\vec{a}'_3 &= \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2/3} & 1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{6} & 1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{6} & -1/\sqrt{3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1/\sqrt{3} \\ 2\sqrt{2/3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 + \sqrt{2/3}\sqrt{1/3} + 1/\sqrt{3}(2\sqrt{2/3}) \\ 1/\sqrt{2}(1) - 1/\sqrt{6}(1/\sqrt{3}) + 1/\sqrt{3}(2\sqrt{2/3}) \\ 1/\sqrt{2}(1) + 1/\sqrt{6}(1/\sqrt{3}) - 1/\sqrt{3}(2\sqrt{2/3}) \end{pmatrix} = \\
&= \begin{pmatrix} \sqrt{2}/3 + 2\sqrt{2}/3 \\ 1/\sqrt{2} - 1/\sqrt{18} + 2\sqrt{2}/3 \\ 1/\sqrt{2} + 1/\sqrt{18} - 2\sqrt{2}/3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3\sqrt{2}/3 \\ 1/\sqrt{2} - 1/(3\sqrt{2}) + 2\sqrt{2}/3 \\ 1/\sqrt{2} + 1/(3\sqrt{2}) - 2\sqrt{2}/3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{2} \\ \sqrt{2}/2 - \sqrt{2}/6 + 2\sqrt{2}/3 \\ \sqrt{2}/2 + \sqrt{2}/6 - 2\sqrt{2}/3 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \sqrt{2} \\ \sqrt{2}(1/2 - 1/6 + 2/3) \\ \sqrt{2}(1/2 + 1/6 - 2/3) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{2} \\ \sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix} = \vec{a}_3
\end{aligned}$$

Problema 3

La constante de Madelung para la estructura cúbica de ZnS es 1.638. Calcular la energía de enlace para el ZnS para el que $r_0 = 0.235nm$ y para el $CuCl$ que tiene la misma estructura con $r_0 = 0.234nm$. Los valores experimentales son $37.9eV$ / molécula para ZnS y $9.81eV$ / molécula para $CuCl$.

Según vimos en clase, la energía de enlace por molécula en equilibrio es de:

$$U = -\frac{\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left(1 - \frac{1}{n}\right),$$

donde α es la constante de Madelung, r_0 es la separación y n es el parámetro asociado a la fuerza repulsiva propuesta por Born. Como vimos en clase, el parámetro n en general toma un valor de aproximadamente $n = 9$. Por lo tanto, calculamos directamente la energía para cada una de las moléculas:

- ZnS :

En este caso, el problema nos dice que $\alpha = 1.638$ y que $r_0 = 0.235nm$, además que usamos $n = 9$, por lo que nos queda que:

$$\begin{aligned} U &= -\frac{\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left(1 - \frac{1}{n}\right) \\ &= -\frac{(1.638)(1.6 \times 10^{-19}C)^2}{4\pi(8.85 \times 10^{-12}Fm^{-1})(0.235 \times 10^{-9}m)} \left(1 - \frac{1}{9}\right) \\ &= -1.42941 \times 10^{-18}J \\ &= -8.92235eV \end{aligned}$$

- $CuCl$:

En este caso, el problema nos dice nuevamente que $\alpha = 1.638$ y que $r_0 = 0.234nm$, además que usamos $n = 9$, por lo que nos queda que:

$$\begin{aligned} U &= -\frac{\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left(1 - \frac{1}{n}\right) \\ &= -\frac{(1.638)(1.6 \times 10^{-19}C)^2}{4\pi(8.85 \times 10^{-12}Fm^{-1})(0.234 \times 10^{-9}m)} \left(1 - \frac{1}{9}\right) \\ &= -1.4355 \times 10^{-18}J \\ &= -8.9605eV \end{aligned}$$

Vemos que el resultado da una buena predicción para $CuCl$ (en la que el valor real es $9.81eV$) pero no es buena para el ZnS , en la que el valor es $37.9eV$.

Problema 4

El módulo volumétrico de elasticidad de un sólido se define como

$$B = -V \frac{\partial P}{\partial V} = V \frac{\partial^2 U}{\partial V^2}$$

Demostrar que si para un cristal iónico se escribe $V = \gamma r^3$ se obtiene

$$B = \frac{N_A \alpha e^2 (n-1)}{9 \gamma 4 \pi \epsilon_0 r_0^4}$$

Calcular el módulo volumétrico de elasticidad de NaCl suponiendo que $n = 9$ y $\gamma = 2$ (justificar el uso de este valor). Comparar con el valor experimental de $4.2 \times 10^{11} \text{ N/m}^2$

En clase vimos que la energía de formación de un cristal (ecuación 11.27 de las notas) es:

$$U = -\frac{N \alpha e^2}{4 \pi \epsilon_0 r_0} \left[\frac{r_0}{r} - \frac{1}{n} \left(\frac{r_0}{r} \right)^n \right],$$

donde r_0 es la separación de equilibrio, N es la cantidad de moléculas y α la constante de Madelung. Luego, el ejercicio nos dice que $V = \gamma r^3$, lo que significa que $r = (V/\gamma)^{1/3}$ y reemplazando esto nos queda:

$$\begin{aligned} U &= -\frac{N \alpha e^2}{4 \pi \epsilon_0 r_0} \left[\frac{r_0}{(V/\gamma)^{1/3}} - \frac{1}{n} \left(\frac{r_0}{(V/\gamma)^{1/3}} \right)^n \right] \\ &= -\frac{N \alpha e^2}{4 \pi \epsilon_0 r_0} \left[\frac{r_0 \gamma^{1/3}}{V^{1/3}} - \frac{1}{n} \frac{r_0^n \gamma^{n/3}}{V^{n/3}} \right] \\ &= -\frac{N \alpha e^2}{4 \pi \epsilon_0 r_0} \left[r_0 \gamma^{1/3} V^{-1/3} - \frac{r_0^n \gamma^{n/3}}{n} V^{-n/3} \right] \end{aligned}$$

Por lo tanto, ya tenemos U escrito en términos de V y podemos entonces usar la definición de B :

$$\begin{aligned} B &= V \frac{\partial^2 U}{\partial V^2} \\ &= V \frac{\partial^2}{\partial V^2} \left[-\frac{N \alpha e^2}{4 \pi \epsilon_0 r_0} \left(r_0 \gamma^{1/3} V^{-1/3} - \frac{r_0^n \gamma^{n/3}}{n} V^{-n/3} \right) \right] \\ &= -\frac{N V \alpha e^2}{4 \pi \epsilon_0 r_0} \frac{\partial^2}{\partial V^2} \left(r_0 \gamma^{1/3} V^{-1/3} - \frac{r_0^n \gamma^{n/3}}{n} V^{-n/3} \right) \\ \text{Derivamos una vez} \\ &= -\frac{N V \alpha e^2}{4 \pi \epsilon_0 r_0} \frac{\partial}{\partial V} \left(-\frac{1}{3} r_0 \gamma^{1/3} V^{-4/3} + \frac{n}{3} \frac{r_0^n \gamma^{n/3}}{n} V^{-n/3-1} \right) \\ &= -\frac{N V \alpha e^2}{4 \pi \epsilon_0 r_0} \left(\frac{4}{9} r_0 \gamma^{1/3} V^{-7/3} - \frac{r_0^n \gamma^{n/3}}{3} \left(\frac{n}{3} + 1 \right) V^{-n/3-2} \right) \end{aligned}$$

Ahora podemos sustituir $V = \gamma r^3$ para tener la expresión en términos de r en vez de V :

$$\begin{aligned} B &= -\frac{N \gamma r^3 \alpha e^2}{4 \pi \epsilon_0 r_0} \left(\frac{4}{9} r_0 \gamma^{1/3} \gamma^{-7/3} r^{-7} - \frac{r_0^n \gamma^{n/3}}{3} \left(\frac{n}{3} + 1 \right) \gamma^{-n/3-2} r^{-n-6} \right) \\ &= -\frac{N \gamma r^3 \alpha e^2}{4 \pi \epsilon_0 r_0} \left(\frac{4}{9} r_0 \gamma^{-2} r^{-7} - \frac{r_0^n \gamma^{-2}}{3} \left(\frac{n}{3} + 1 \right) r^{-n-6} \right) \end{aligned}$$

El módulo volumétrico se tiene que calcular en el punto de equilibrio, por lo que hacemos $r = r_0$ y entonces nos queda:

$$\begin{aligned}
 B &= -\frac{N\gamma r_0^3 \alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left(\frac{4}{9} r_0 \gamma^{-2} r_0^{-7} - \frac{r_0^n \gamma^{-2}}{3} \left(\frac{n}{3} + 1 \right) r_0^{-n-6} \right) \\
 &= -\frac{N\gamma r_0^2 \alpha e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{4}{9} \gamma^{-2} r_0^{-6} - \frac{\gamma^{-2}}{3} \left(\frac{n}{3} + 1 \right) r_0^{-6} \right) \\
 &\text{Factorizamos algunos términos} \\
 &= -\frac{N\gamma r_0^2 \alpha e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{4}{9} \gamma^{-2} r_0^{-6} \left(1 - \frac{3}{4} \left(\frac{n}{3} + 1 \right) \right) \\
 &= -\frac{N\alpha e^2}{9\pi\epsilon_0 \gamma r_0^4} \left(1 - \frac{n}{4} - \frac{3}{4} \right) \\
 &= -\frac{N\alpha e^2}{9\pi\epsilon_0 \gamma r_0^4} \left(\frac{1-n}{4} \right) \\
 &= \boxed{\frac{N\alpha e^2(n-1)}{9\gamma 4\pi\epsilon_0 r_0^4}},
 \end{aligned}$$

que es el resultado que se buscaba.

Ahora calculamos el módulo volumétrico de $NaCl$ suponiendo que $n = 9$ y $\gamma = 2$. Simplemente sustituimos estos valores $n = 9, \gamma = 2$ y lo hacemos para $N = 1$ moléculas (para tener así el valor por molécula). Sustituyendo en la expresión de B , tenemos que:

$$\begin{aligned}
 B &= \frac{(1)\alpha e^2(9-1)}{9(2)4\pi\epsilon_0 r_0^4} \\
 &= \frac{(1)\alpha e^2}{9\pi\epsilon_0 r_0^4}
 \end{aligned}$$

Sustituimos los valores de α y r_0 mencionados en las notas, que son $\alpha = 1.7476, r_0 = 2.81 \times 10^{-10}m$. En la siguiente imagen se ve la sustitución en Mathematica.

```

In[17]:= r0 = 2.81*10^(-10);
alpha = 1.7476;
eps0 = 8.8541878176*10^(-12);
e = -1.602176634*10^(-19);
alpha*e^2/(9*Pi*eps0*r0^4)

Out[21]= 2.87406*10^10

```

Por lo tanto, el valor encontrado es de:

$$\boxed{2.874 \times 10^{10} N/m^2}$$

Este valor encontrado es casi un orden de magnitud menor que el experimental de $4.2 \times 10^{11} N/m^2$. Esto muestra que usar el potencial de Born (a diferencia de el de Born-Mayer que vimos en clase), la predicción de la compresibilidad es bastante mala.

Nota: Se toma $\gamma = 2$ porque de esa forma $V = \gamma r^3$ es el volumen de una molécula de $NaCl$. Esto se puede entender viendo la figura 11.14 de las notas, que se presenta aquí también.

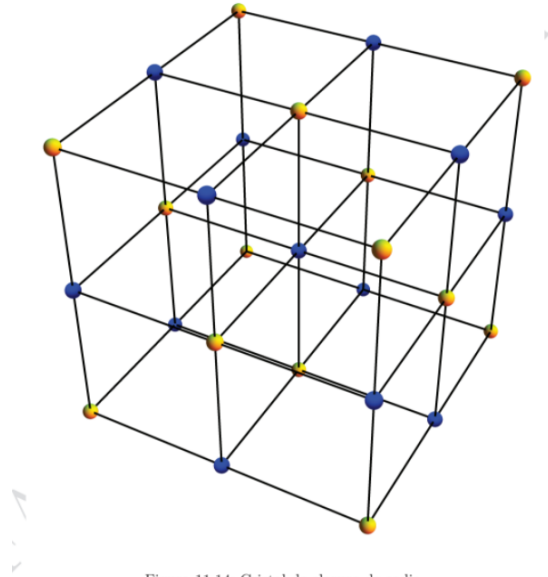


Figura 11.14: Cristal de cloruro de sodio.

Cada uno de los 8 cubos en el cristal tienen un volumen de r^3 . Pero estos cubos no contienen una molécula completa, pues solamente tienen medio átomo de Na y medio átomo de Cl (tomando en cuenta que cada átomo está en una intersección entre 8 cubos, por lo que cada cubo tiene $1/8$ de átomo). Luego, para tener el volumen de una molécula de $NaCl$, se tienen que considerar dos de estos cubos y por eso $V = 2r_0^3$, es decir $\gamma = 2$.

Problema 5

Calcular el número n_0 de electrones por unidad de volumen de la banda de conducción del litio, el cobre y el aluminio usando los siguientes valores de la energía de Fermi. *Li*: $4.72eV$, *Cu*: $7.00eV$ y *Al*: $11.63eV$. Comparar los resultados con el número de electrones de valencia por unidad de volumen en estos elementos.

Para calcular este número, usamos la ecuación 12.19 de las notas, que dice que si la energía de Fermi de un material es \mathcal{E}_F , entonces el número de partículas en un gas de Fermi es:

$$\frac{V}{3\pi^2\hbar^3}(2m\mathcal{E}_F)^{3/2},$$

donde V es el volumen ocupado y m es la masa del electrón. Luego, el número de electrones por unidad de volumen se obtiene dividiendo por V , por lo que tenemos:

$$n_0 = \frac{1}{3\pi^2\hbar^3}(2m\mathcal{E}_F)^{3/2}$$

Ahora solamente hay que sustituir las variables en esta ecuación para cada caso:

- Litio: Sustituimos $\mathcal{E}_F = 4.72eV$ y las constantes

$$\begin{aligned} n_0 &= \frac{1}{3\pi^2(6.582119569 \times 10^{-16}eV \cdot s)^3}(2(0.511 \times 10^6eV/c^2)(4.72eV))^{3/2} \\ &= 4.6566 \times 10^{28} \text{ electrones } /m^3 \end{aligned}$$

- Cobre: Sustituimos $\mathcal{E}_F = 7eV$ y las constantes

$$\begin{aligned} n_0 &= \frac{1}{3\pi^2(6.582119569 \times 10^{-16}eV \cdot s)^3}(2(0.511 \times 10^6eV/c^2)(7eV))^{3/2} \\ &= 8.4103 \times 10^{28} \text{ electrones } /m^3 \end{aligned}$$

- Aluminio: Sustituimos $\mathcal{E}_F = 11.63eV$ y las constantes

$$\begin{aligned} n_0 &= \frac{1}{3\pi^2(6.582119569 \times 10^{-16}eV \cdot s)^3}(2(0.511 \times 10^6eV/c^2)(11.63eV))^{3/2} \\ &= 1.8011 \times 10^{29} \text{ electrones } /m^3 \end{aligned}$$

Calculamos ahora también el número de electrones de valencia por unidad de volumen de estos elementos.

- Litio: La densidad del litio es de $0.534g/cm^3$ según [1], lo que significa que en un m^3 se tienen $534000g$ de litio. Además, por la definición del número de Avogadro N_A y como la masa atómica del Litio es 6.938 [2], entonces en $6.938g$ de litio se tienen N_A átomos.

Eso significa que en $1m^3$, en donde hay $534000g$ de Litio, se tienen $534000/6.938 \cdot N_A = 4.635 \times 10^{28}$ átomos de Litio. Luego, cada átomo de Litio tiene solamente un electrón en la capa de valencia (pues la configuración es $1s^22s$) y entonces la cantidad de electrones de valencia es igual a la cantidad de átomos. Por lo tanto, hay 4.635×10^{28} electrones de valencia por m^3 .

Esto coincide muy bien con el valor obtenido antes para los electrones de conducción de 4.6566×10^{28} electrones $/m^3$.

-
- Cobre: La densidad del cobre es de $8.96g/cm^3$ según [1], lo que significa que en un m^3 se tienen $8960000g$ de cobre. Además, por la definición del número de Avogadro N_A y como la masa atómica del cobre es 63.546 [2], entonces en $63.546g$ de cobre se tienen N_A átomos.

Eso significa que en $1m^3$, en donde hay $8960000g$ de cobre, se tienen $8960000/63.546 \cdot N_A = 8.49103 \times 10^{28}$ átomos de cobre. Luego, cada átomo de cobre tiene solamente un electrón en la capa de valencia (pues la configuración es $3d^{10}4s^1$) y entonces la cantidad de electrones de valencia es igual a la cantidad de átomos. Por lo tanto, hay 8.49103×10^{28} electrones de valencia por m^3 .

Esto coincide muy bien con el valor obtenido antes para los electrones de conducción de 8.4103×10^{28} electrones $/m^3$.

- Aluminio: La densidad del litio es de $2.702g/cm^3$ según [1], lo que significa que en un m^3 se tienen $2702000g$ de aluminio. Además, por la definición del número de Avogadro N_A y como la masa atómica del aluminio es 26.981 [2], entonces en $26.981g$ de aluminio se tienen N_A átomos.

Eso significa que en $1m^3$, en donde hay $2702000g$ de aluminio, se tienen $2702000/26.981 \cdot N_A = 6.0307 \times 10^{28}$ átomos de aluminio. Luego, cada átomo de aluminio tiene tres electrones de valencia (pues la configuración es $[Ne]3s^23p^1$) y entonces la cantidad de electrones de valencia es igual a la cantidad de átomos multiplicada por 3. Por lo tanto, hay 1.8092×10^{29} electrones de valencia por m^3 .

Esto coincide muy bien con el valor obtenido antes para los electrones de conducción de 1.8011×10^{29} electrones $/m^3$.

Referencias

- [1] “Density of Elements Chart.” Density of Elements Chart – Angstrom Sciences Elements Density Table, <https://www.angstromsciences.com/density-elements-chart>.
- [2] “IUPAC Commission on Isotopic Abundances and Atomic Weights.” IUPAC Commission on Isotopic Abundances and Atomic Weights, <https://www.ciaaw.org/>.