

Problemas Estado Sólido

Abel Doñate Muñoz

Contents

1	Estructura cristalina	2
2	Dinámica de los cristales	2

1 Estructura cristalina

2 Dinámica de los cristales

1 Consideramos un cristal iónico unidimensional infinito, construido por una sucesión de átomos con masa m y carga $+q$ y $-q$ alternativamente. El potencial interatómico es $V_i(r_i) = \frac{A}{|r_i - r_{i-1}|^n} + \frac{A}{|r_{i+1} - r_i|^n} + \sum_{i \neq j} \varepsilon \frac{q_i q_j}{|r_i - r_j|}$. El parámetro de red a corresponde a la posición de equilibrio en $T = 0$.

a) Calculad el valor de la constante A en función del parámetro de red y demostrad que la energía de enlace es $E_0 = \frac{\varepsilon q^2 \ln 2}{a} (1 - \frac{1}{n})$

b) Calculad la compresibilidad del cristal y la velocidad del sonido.

a) (dibujito) Sea r la distancia entre átomos cuando $T = 0$. Entonces

$$U_T = \frac{1}{2} (2N \frac{2A}{r^n} + \sum_{j=1}^{2N} \sum_{l \neq 0} (-1)^l \varepsilon \frac{q^2}{|l|r}) = \frac{2NA}{r^n} - \frac{2Nq^2 \varepsilon \ln 2}{r}$$

Si diferenciamos con respecto a r e igualamos a cero encontramos la posición de equilibrio

$$0 = \frac{dU_T}{dr} = -\frac{2NA n}{a^{n+1}} + \frac{2nq^2 \varepsilon \ln 2}{a^2} \Rightarrow \boxed{A = \frac{a^{n-1} \varepsilon \ln 2 q^2}{n}}$$

Y la energía por enlace es simplemente sustituyendo $E_0 = -\frac{U_T}{2N} = \left(1 - \frac{1}{n}\right) \frac{\varepsilon q^2 \ln 2}{a}$

b) (falta)

2 Calculad la relación de dispersión para una cadena unidimensional de átomos de masa m conectadas por un muelle de constante k_1 para los primeros vecinos y k_2 para los segundos

(dibujito)

Sea x_n la posición respecto a la posición de equilibrio $r_n = an$. Entonces las ecuaciones del movimiento son

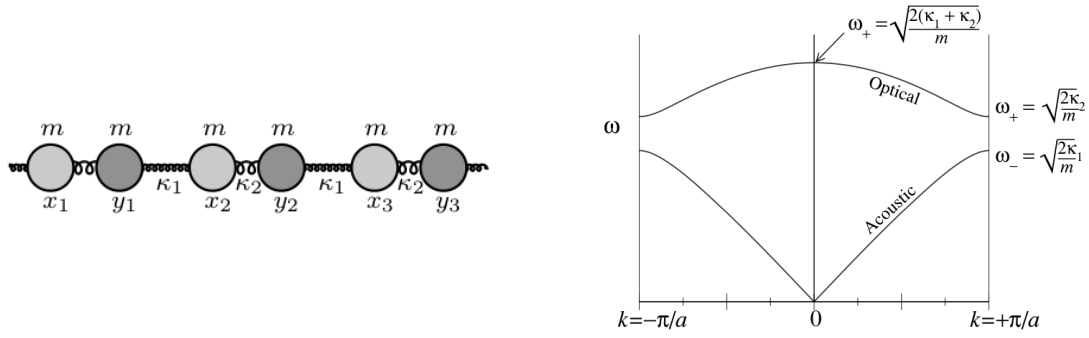
$$F = m\ddot{x}_n = k_1(x_{n+1} + x_{n-1} - 2x_n) + k_2(x_{n+2} + x_{n-2} - 2x_n)$$

Suponiendo que se comporta como un oscilador armónico hacemos el siguiente ansatz: $x_n = Ae^{i(kna - \omega t)}$. Vemos ahora que deben cumplir la ω y la k .

$$\begin{aligned} -m\omega^2 Ae^{i(kna - \omega t)} &= k_1 Ae^{i(nka - \omega t)} (e^{ika} + e^{-ika} - 2) + k_2 (e^{2ika} + e^{-2ika} - 2) \\ m\omega^2 &= 4k_1 \left(\frac{\cos(ka) - 1}{2} \right) + 4k_2 \left(\frac{\cos(2ka) - 1}{2} \right) = 4k_1 \sin^2 \left(\frac{ka}{2} \right) + 4k_2 \sin^2(ka) \end{aligned}$$

Por tanto llegamos a la ecuación de dispersión $\omega(k) = \sqrt{\frac{4}{m} \left(k_1 \sin^2 \left(\frac{ka}{2} \right) + k_2 \sin^2(ka) \right)}$

3 Calculad la relación de dispersión para una cadena unidimensional de átomos de masa m conectados con los primeros vecinos por muelles de constantes k_1 y k_2 alternativamente.



Procedemos de manera parecida al ejercicio anterior, pero apreciamos algunos cambios. En primer lugar las amplitudes serán diferentes según el tipo de partícula (par o impar). Las posiciones de equilibrio ya no son equiespaciadas, sino que hay 2 distancias (la del muelle k_1 y la del k_2). Llamaremos x_n e y_n a las variaciones con respecto al equilibrio respectivamente. Si planteamos el diagrama de fuerzas tenemos

$$m\ddot{x}_n = k_1(y_{n-1} - x_n) + k_2(y_n - x_n), \quad m\ddot{y}_n = k_1(x_{n+1} - y_n) + k_2(x_n - y_n)$$

Con todo esto podemos hacer nuestro ansatz como:

$$x_n = Ae^{i(kna - \omega t)} \quad y_n = Be^{i(kna - \omega t)}$$

y obtenemos las ecuaciones

$$-m\omega^2 A = -A(k_1 + k_2) + B(k_1 e^{ika} + k_2), \quad -m\omega^2 B = -A(k_1 e^{ika} + k_2) + B(-k_1 - k_2)$$

Que puede ser escrito en forma matricial como

$$m\omega^2 \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (k_1 + k_2) & -k_2 - k_1 e^{ika} \\ -k_2 - k_1 e^{ika} & (k_1 + k_2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = K \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$$

Con lo que $m\omega$ ha de ser valor propio de la matriz K . Imponiendo esta condición tenemos que

$$0 = \det(K - m\omega^2 I) = |(k_1 + k_2) - m\omega^2|^2 - |k_2 + k_1 e^{ika}|^2$$

cuyas raíces son $m\omega^2 = (k_1 + k_2) \pm |k_1 + k_2 e^{ika}|$. Simplificando el segundo término llegamos a la ecuación de dispersión

$$\omega_{\pm}(k) = \sqrt{\frac{k_1 + k_2}{m} \pm \frac{1}{m} \sqrt{(k_1 + k_2)^2 - 4k_1 k_2 \sin^2(ka/2)}}$$

Cada rama del dibujo corresponde a un signo de la solución de la ecuación de dispersión. El negativo corresponde a la acústica y el positivo a la óptica.

5 Un sistema consta de $N = 10^{23}$ osciladores armónicos unidimensionales de frecuencia propia $\omega = 2\pi \times 10^{13}$. Calcula la energía térmica media del sistema a $T = 2, 20, 200, 2000K$. ¿En qué rango de temperatura se puede tratar el sistema clásicamente?

Calculamos la energía media del sistema

$$\langle E \rangle = N\hbar\omega \left(\langle n \rangle + \frac{1}{2} \right) = N\hbar\omega \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1} \right) \Rightarrow \left\{ \langle E \rangle(T=2) = 331J, \langle E \rangle(T=20) = 331J, \langle E \rangle(T=200) = 397J, \langle E \rangle(T=2000) = 397J \right\}$$

Calculamos ahora la capacidad calorífica

$$C_v = \frac{d\langle E \rangle}{dT} = Nk_B \left(\frac{T_E}{T} \right)^2 \frac{e^{\frac{T_E}{T}}}{(e^{\frac{T_E}{T}} - 1)^2} \quad \text{con} \quad T_E = \frac{\hbar\omega}{k_B} = 480K$$

A partir de $T = 1000K$ se debería comportar clásicamente.

6 La velocidad del sonido del Cu es $\nu_s = 400m/s$. Calculad la frecuencia de Debye y la longitud de onda de las vibraciones atómicas con esta frecuencia, comparadla con el espaciado interatómico entre los átomos de Cu. Recordad que el cobre es una FCC con 4 átomos por celda unidad, $M = 63.546g/mol$, $\rho = 8.92g/cm^3$

Calculamos a a través del siguiente factor de conversión

$$\rho = \frac{4 \text{ at. Cu}}{a^3} \frac{1 \text{ mol}}{N_A \text{ at. Cu}} \frac{63.546g}{1 \text{ mol}} = 8.92g/cm^3 \Rightarrow a = 3.615A \Rightarrow \frac{V}{N} = 11.81A/\text{celda}$$

Calculamos la frecuencia de Debye y después la longitud de onda con las fórmulas

$$\omega_D = \left(\frac{6\pi^2 \nu_s^3 N}{V} \right)^{\frac{1}{3}} = \boxed{6.846 \times 10^{13} rad/s}, \quad k_D = \frac{\omega_D}{\nu_s} = 1.7116A^{-1} = \frac{2\pi}{\lambda_D} \Rightarrow \boxed{\lambda_D = 3.67A}$$

El espaciado interatómico es $a_p = \frac{a}{\sqrt{2}} = 2.56A$