Física del Estado Sólido

Guía 6 – 12 de mayo de 2023

Problema 1: *Cadena lineal monoatómica.* Demuestre que en una cadena unidimensional de átomos de masa M conectados por resortes idénticos de constante K, la relación de dispersión puede escribirse como

$$\omega(k) = 2\sqrt{\frac{K}{M}} \left| \operatorname{sen} \frac{ka}{2} \right| .$$

¿Cuántos "modos normales" se asocian a cada una de estas ω? Analice el comportamiento de ω cuando $k \to 0$ y cuando $k \to \pm\pi/a$.

Problema 2: *Cadena lineal diatómica.* Considere una cadena lineal con interacción a primeros vecinos en la cual los iones poseen, en forma alternada, masas M_1 y M_2.

a) Muestre que la relación de dispersión para los modos normales es

$$\omega^2 = \frac{K}{M_1 M_2} \left(M_1 + M_2 \pm \sqrt{M_1^2 + M_2^2 + 2M_1 M_2 \cos ka} \right) .$$

b) Discuta la frecuencia y la naturaleza de los modos normales cuando $M_1 \gg M_2$.

c) Compare la relación de dispersión con la obtenida en la cadena lineal monoatómica cuando $M_1 \approx M_2$.

d) Estudie la velocidad de grupo $v_g = \dfrac{\partial \omega(k)}{\partial k}$. ¿Qué pasa cuando $M_1 \to M_2$?

Problema 3: *Cadena lineal con interacción a m-ésimos vecinos.* Reexamine la teoría de la cadena lineal pero sin hacer la suposición de interacción a primeros vecinos. Para ello, reemplace el potencial armónico por

$$U = \frac{1}{2} \sum_n \sum_{m>0} K_m \Big[u(na) - u\big((n+m)a\big) \Big]^2 .$$

a) Muestre que la relación de dispersión debe generalizarse a

$$\omega = 2\sqrt{\sum_{m>0} K_m \frac{\operatorname{sen}^2 \frac{mka}{2}}{M}} . \tag{1}$$

b) En el límite de longitud de onda larga, muestre que la relación de dispersión toma la forma

$$\omega = a \left(\sum_{m>0} m^2 \frac{K_m}{M} \right)^{1/2} |k| .$$

asumiendo que la suma sobre m es convergente.

Problema 4: *Calor específico de un cristal clásico.* El calor específico debido a las vibraciones de la red en un cristal clásico es $3k_B$ por ion, lo que es conocido como la ley de Doulong y Petit.
¿Cuándo espera que esta ley sea satisfecha, a bajas o altas temperaturas?

Problema 5. Escriba las ecuaciones que determinan los modos normales en 3 dimensiones para el caso clásico de una red monoatómica de N sitios con condiciones periódicas de contorno. Describa cuántas ramas hay y cuántos valores de k permitidos por banda se tienen. Explique qué ocurre con una red con base de p sitios.

Problema 6. *Forma general del calor específico de una red cristalina.* Asumiendo una relación de dispersión arbitraria para los fonones en un cristal, obtenga una expresión general para el calor específico (enfoque cuántico).

Problema 7. *Límites de altas y bajas temperaturas para el calor específico de una red cristalina.* Usando los resultados obtenidos en el problema anterior para la forma general del calor específico de una red cristalina, evalúe los límites de alta y baja temperatura para el calor específico de la red cristalina.

Problema 8. *Calor específico para temperaturas intermedias: Modelo de Debye y Einstein.* Obtenga el calor específico de la red cristalina usando los modelos de Debye y Einstein; grafique ambos resultados como función de la temperatura. Comente las similitudes y diferencias entre ambos resultados.

Problema 9. Muestre que en el modelo de Einstein la contribución de cada rama óptica al calor específico para $T \gg \Theta_E$ (Θ_E es la temperatura de Einstein) es constante, e igual a nk_B (n es la densidad de sitios de la red de Bravais), de acuerdo con la ley de Dulong y Petit.

Problema 10. Considere que se aplica el modelo de Debye sólo a las ramas acústicas y que las ramas ópticas se representan por el modelo de Einstein. Dibuje en un mismo gráfico la contribución de ambas ramas al calor específico de un sólido tridimensional con base de 1, 2 y 3 iones. Exprese el calor específico en unidades de $3nk_B$ (n es la densidad de sitios de la red) y la temperatura en unidades de Θ de Debye o de Einstein, según la curva que se grafique.

Problema 11.

a) Muestre que la densidad de modos normales para una cadena lineal monoatómica con constante de red a y con interacción a primeros vecinos es

$$g(\omega) = \frac{2}{\pi a} \frac{1}{(\omega_o^2 - \omega^2)^{1/2}} \, ,$$

en donde ω_o es la frecuencia máxima. La singularidad en $\omega = \omega_o$ es una singularidad de van Hove.

b) Asumiendo que una rama óptica en un sólido tridimensional tiene la forma $\omega(k) = \omega_0 - Ak^2$ cerca de $k = 0$, muestre que la densidad de modos normales es

$$g(\omega) = \begin{cases} \dfrac{\sqrt{\omega_o - \omega}}{4\pi^2 A^{3/2}} & \omega < \omega_o \\[2ex] 0 & \omega \geq \omega_o \end{cases}$$