

Aux 6 - preparación C1

P1]

a) ~

$$b) \langle E \rangle = E_0 + \overbrace{\frac{1}{2} \sum_{S, \vec{K}} \hbar \omega_S(\vec{K})}^{E_1} + \overbrace{\sum_{S, \vec{K}} \frac{\hbar \omega_S(\vec{K})}{e^{\beta \hbar \omega_S(\vec{K})} - 1}}^{E_2}$$

E_0 es una energía de referencia, la energía de osciladores en equilibrio y sin oscilar.

E_1 es un término cuántico que da cuenta de la energía de los modos normales a $T=0$.

E_2 es el término dependiente de la T , por lo tanto es el que contribuye al calor específico.

El número de ocupación del fonón es $1/(e^{\beta \hbar \omega_S} - 1)$, y representa la probabilidad de hallar un fonón en un estado.

La sumatoria recorre S y $\vec{K}$,

$$S = \overbrace{1, 2, 3, \dots, 3r}^{\text{óptica}} \quad \text{para base de } r \text{ átomos}$$

$$\vec{K} = \overbrace{\left(\frac{m_1}{N_1}\right) \vec{b}_1}^{\text{acústica}} + \left(\frac{m_2}{N_2}\right) \vec{b}_2 + \left(\frac{m_3}{N_3}\right) \vec{b}_3 \quad N_1 N_2 N_3 = N$$

$\hookrightarrow$ hay N vectores $\vec{K} \in 1^{\text{a}}$ zona de Brillouin

$\Rightarrow$ la sumatoria tiene $3Nr$ términos

c) Límite de alta temperatura: $k_B T \rightarrow \infty$ y $\beta \rightarrow 0$

$$\exp(x) \approx 1 + x \quad \text{cuando } x \ll 1$$

$$\Rightarrow \exp(\beta \hbar \omega_s) - 1 \approx 1 + \beta \hbar \omega_s - 1 = \beta \hbar \omega_s(\vec{k})$$

$$\langle E \rangle = \frac{1}{2} \sum_{s, \vec{k}} \hbar \omega_s(\vec{k}) + \sum_{s, \vec{k}} \frac{\hbar \omega_s(\vec{k})}{\beta \hbar \omega_s(\vec{k})} = \frac{1}{2} \sum_{s, \vec{k}} \hbar \omega_s(\vec{k}) + 3N k_B T$$

$$\left(\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} \right)_V = 3N k_B$$

En 2D, $s = \overset{\text{acústica}}{1, 2, \dots, 2f} \Rightarrow C_V = 2N k_B$
 $\underbrace{\hspace{1.5cm}}_{\text{óptica}}$

d) Consideraremos sólo el término E_z de la energía, pues es el que aporta al C_V .

$$i) \sum_{s, \vec{k}} \frac{\hbar \omega_s(\vec{k})}{e^{\beta \hbar \omega_s(\vec{k})} - 1} \cdot \frac{(\Delta k)^3}{(\Delta k)^3} \approx \frac{1}{(\Delta k)^3} \sum_s \int \frac{\hbar \omega_s(\vec{k})}{e^{\beta \hbar \omega_s} - 1} (\Delta k)^3$$

ii) Los modos con $\hbar \omega \gg k_B T$ contribuyen poca, pues el integrando entonces se decae exponencialmente

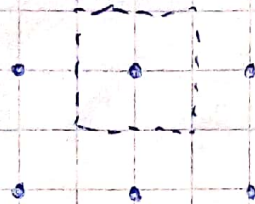
iii) Como $\omega(\vec{k}) \rightarrow 0$ cuando $k \rightarrow 0$ en las ramas acústicas, ésto serán los modos que contribuyen al C_V en bajas T .

iv) Como $\omega(\vec{k}) \neq 0$ en $k=0$ en las ramas ópticas, podemos ignorarlas.

$$v) \omega_s(\vec{k}) = c_s \cdot \vec{k}$$

$\hookrightarrow$ velocidad del sonido

$$\frac{1}{(\Delta K)^3} \sum_s \int \frac{\hbar C_s K}{e^{\beta \hbar C_s K} - 1} d^3 K = \frac{\hbar C_s}{(\Delta K)^3} \int \frac{K}{e^{\beta \hbar C_s K} - 1} d^3 K$$

$\Delta K \Rightarrow$  $(\Delta K)^3 = \frac{(2\pi)^3}{L^3} = \frac{8\pi^3}{V}$

en coord. esféricas,

$$\frac{\hbar C_s}{(\Delta K)^3} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^{K'} \frac{K \cdot K^2 \sin\theta}{e^{\beta \hbar C_s K} - 1} dK d\theta d\phi = \frac{4\pi \hbar C_s}{(\Delta K)^3} \int_0^\infty \frac{K^3}{e^{\beta \hbar C_s K} - 1} dK \quad (ii)$$

cambio de variable:

$$\beta \hbar C_s K = X$$

$$dX = \beta \hbar C_s dK \Rightarrow dK = \frac{dX}{\beta \hbar C_s}$$

$$K^3 = \frac{X^3}{(\beta \hbar C_s)^3}$$

$$\Rightarrow \frac{4\pi \hbar C_s}{(\Delta K)^3} \int_0^\infty \frac{1}{(\beta \hbar C_s)^4} \cdot \frac{X^3}{e^X - 1} dX$$

$$= \frac{4\pi \hbar C_s (K_B T)^4}{(\Delta K)^3 (\hbar C_s)^4} \int_0^\infty \frac{X^3}{e^X - 1} dX = \frac{K_B^4 T^4 V}{2\pi^2 \hbar^3 C_s^3} \cdot \frac{\pi^2}{15}$$

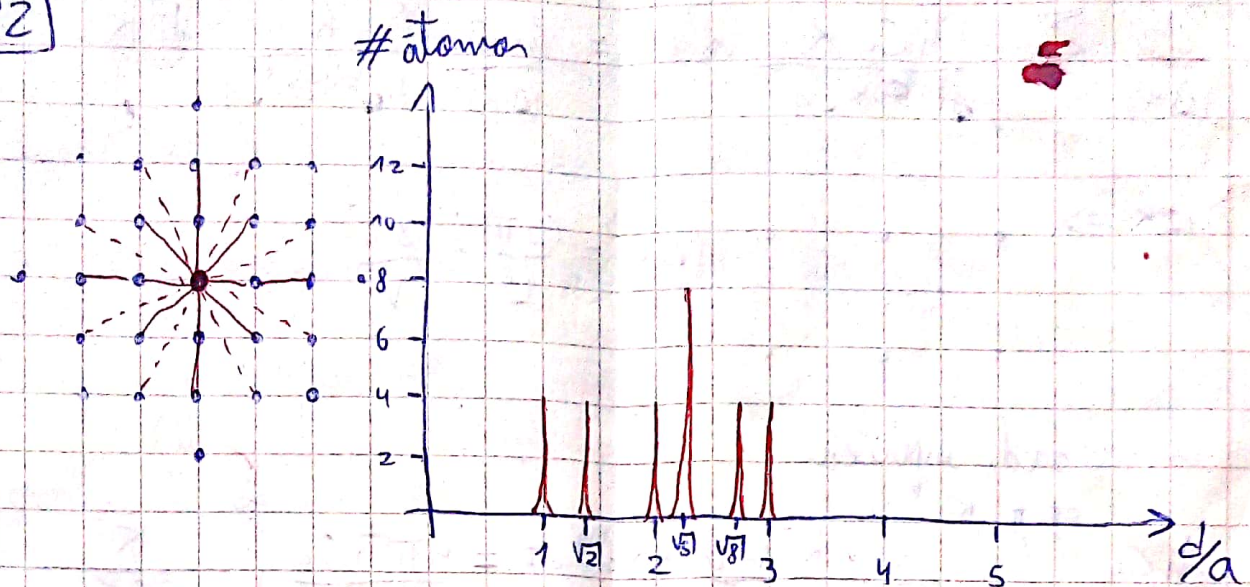
además, se tiene que $\frac{1}{C^3} = \frac{1}{3} \sum_s \int \frac{\sin\theta d\theta d\phi}{4\pi} \frac{1}{C_s^3(R)}$

$$\Rightarrow \frac{K_B^4 T^4 \pi^2}{2 \hbar^3 C_s^3} \cdot \frac{3V}{15} = \frac{\pi^2 K_B^4 T^4 V}{10 \hbar^3 C_s^3}$$

$$\Rightarrow C_V = \left(\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} \right)_V = \frac{2\pi^2}{5} K_B \left(\frac{K_B T}{\hbar C} \right)^3 V$$

$$\int_0^\infty \frac{x^2 dx}{e^x - 1} = 2\zeta(3) \approx 2.40411$$

P2)



(a) está ordenada (estructura cristalina ordenada)

(b) presenta ordenamiento aleatorio (amorfa)

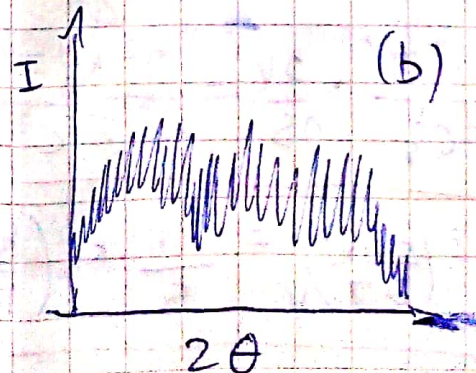
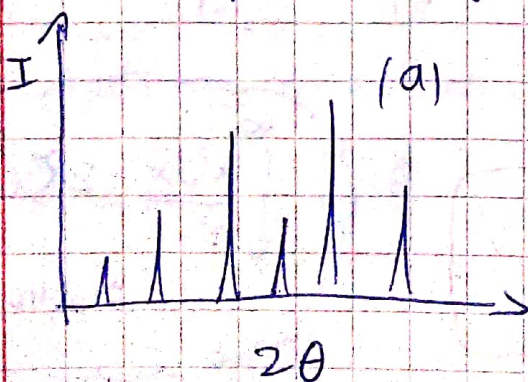
Tipo de experimento:

Rayos X : estructura

Neutrones : estructura (elementos livianos, sección eficaz baja), espectro de fonones y estructura magnética

Raman : estructura e identidad química, fase y polimorfismo, contaminación e impurezas.

$\Rightarrow$ el mejor son rayos X.

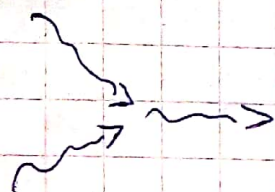


P3)

a) Este proceso no es posible en la aproximación del cristal armónico, ya que es un efecto anarmónico asociado al término X^3 .

b) Conservación de energía:

$$\sum \hbar \omega_s(\vec{k})|_{\text{antes}} = \sum \hbar \omega_s(\vec{k})|_{\text{después}}$$



$$\hbar \omega_{s,1}(\vec{k}_1) + \hbar \omega_{s,2}(\vec{k}_2) = \hbar \omega_{s,3}(\vec{k}_3)$$

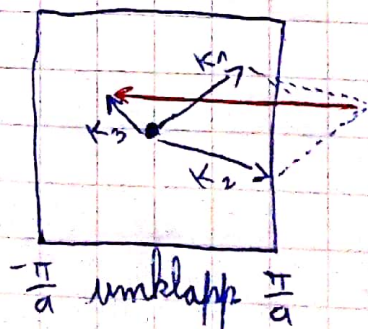
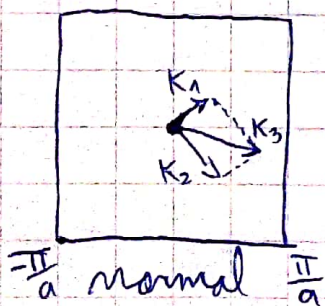
Conservación del cuasimomento o momento cristalino:

$$\sum \vec{k}_i|_{\text{antes}} = \sum \vec{k}_i|_{\text{después}} + \vec{G}$$

$$\vec{k}_1 + \vec{k}_2 = \vec{k}_3 + \vec{G}$$

c) En un proceso normal, $\vec{G} = 0$. El vector $\vec{k}_3$ vive dentro de la primera zona de Brillouin.

En un proceso umklapp, $\vec{G} \neq 0$. $\vec{k}_1 + \vec{k}_2$ cae fuera de la 1ª zona de Brillouin.



d) Los procesos normales conservan la dirección de propagación de la energía (propia de la propagación de ondas). No están asociados a procesos de terminación.

Los procesos unklapp son los responsables de la terminación, pues cambian la dirección de propagación de la energía. Son procesos difusivos.