Lo que faltaba de la clase ...

Tenemos un sólido 3D (sin base) $\Rightarrow$ tenemos solamente 3 bandas acústicas

$C_V = \frac{dE}{dT} = \frac{d\tilde{E}}{dT}$, con $\tilde{E}$ la parte de la energía que depende de la temperatura.

$$\tilde{E} = \int \frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega}-1} D(\omega)\, d\omega \quad , \text{ con } \beta = \frac{1}{k_B T}$$

Para modelar las bandas <u>acústicas</u> vamos a usar la aproximación de <u>Debye</u>

$D(\omega) = D_{ac}(\omega)$ y $D^{3D}_{debye} = \frac{V}{2\pi^2}\frac{\omega^2}{c^3} \times \Theta(\omega_D - \omega)$ para una banda acústica con velocidad del sonido "c". ($\omega = cq$)

$$\underbrace{}\quad D(\omega) = 3\,\frac{V}{2\pi^2}\frac{\omega^2}{c^2}\,\Theta(\omega_D-\omega)$$

3 → viene de que tengo 3 bandas acústicas con la misma velocidad c

$$\Rightarrow u = \frac{\tilde{E}}{V} = \int_0^{\omega_D} \frac{3\hbar\omega^3}{(e^{\beta\hbar\omega}-1)} \frac{d\omega}{2\pi^2 c^3} \qquad \rightarrow \qquad C_V' = \frac{du}{dT} = \frac{C_V}{V}$$

Ahora podemos hacer el cambio de variables $x = \beta\hbar\omega$

$$\Rightarrow \boxed{u = \frac{3}{2\pi^2}\frac{(k_B T)^4}{(c\hbar)^3}\int_0^{x_D}\frac{x^3}{(e^x-1)}dx} \qquad \text{Con } \boxed{x_D = \frac{\hbar\omega_D}{k_B T}}$$

1) Aprox. bajas temperaturas

Definimos un $T_D = \frac{\hbar\omega_D}{k_B}$ → Tomo $T \ll T_D \Rightarrow x_D \to \infty$

$$u = \frac{3}{2\pi^2}\underbrace{\frac{(k_B T)^4}{(c\hbar)^3}}_{\text{única dependencia con } T}\underbrace{\int_0^{\infty}\frac{x^3}{(e^x-1)}dx}_{\text{Integral de tabla independiente de } T}$$

$$\Rightarrow \boxed{C_V'^{\,\text{bajas}} \propto T^3}$$ ✓

2) Aprox. altas temperaturas

$T \gg T_D$ en particular $\hbar\omega \ll k_B T$ para cualquier ω en el intervalo de integración $[0, \omega_D]$

$$\Rightarrow \quad e^x \sim 1 + x + \frac{x^2}{2} \quad y \quad \frac{x^3}{e^x - 1} \sim \frac{x^3}{x + \frac{x^2}{2}} = \frac{x^2}{1+\frac{x}{2}} \sim x^2\left(1 - \frac{x}{2}\right)$$

$\sim x^2$ a orden más bajo.

$$\Rightarrow \quad u = \frac{3}{2\pi^2} \frac{(k_B T)^4}{(c\hbar)^3} \underbrace{\int_0^{x_D} x^2\, dx}_{\frac{x_D^3}{3} = \frac{(\hbar\omega_D)^3}{3(k_B T)^3}}$$

$$u = \frac{k_B T}{2\pi^2 (\hbar c)^3} (\hbar \omega_D)^3 \longrightarrow c_V = \frac{k_B}{2\pi^2} \frac{\omega_D^3}{c^3}$$

$$\#\text{grados de libertad} = \underset{\substack{\text{átomos} \\ \text{de la red}}}{3N} = \int D(\omega)\, d\omega = \int_0^{\omega_D} 3 \frac{V}{2\pi^2} \frac{\omega^2}{c^3}\, d\omega$$

$$\Rightarrow \quad \frac{N}{V} = n = \frac{1}{2\pi^2 c^3} \frac{\omega_D^3}{3} \Rightarrow 3n = \frac{\omega_D^3}{2\pi^2 c^3}$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{c_V^{T \gg T_D} = 3 n k_B} \longrightarrow \text{límite clásico de Dulong-Petit}$$

Problema 13

2 ramas acústicas y 2 ópticas

$$\left.\begin{array}{l} d=2 \\ d(r-1)=2 \end{array}\right\} \Rightarrow 2D \text{ y } 2 \text{ elementos en la base.}$$

- Las 2 acústicas (Debye) $\rightarrow$ $\omega = C q$ (el mismo c para las 2).
- ópticos $\left.\begin{array}{l} \omega \sim \omega_1 \\ \omega \sim \omega_2 \end{array}\right\} \rightarrow$ Modelo de Einstein

$$d r . N = 4N = \int (D_{ac} + D_{op})\, d\omega$$

$D_{op} = D_{op}^1 + D_{op}^2$ y c/ banda tiene N estado

$$\Rightarrow \quad D_{op}^1 = N\,\delta(\omega-\omega_1) \quad , \quad D_{op}^2 = N\,\delta(\omega-\omega_2).$$

2 ramas   superficie del cristal 2D.

$$D_{ac} = 2\,\frac{\omega\, S}{2\pi C^2}\,\theta(\omega_D - \omega)$$

$\rightarrow$ está relacionado con N y con ω_D

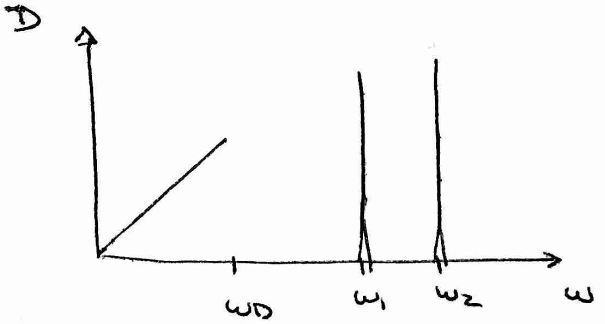
Las bandas acústicas en total tienen 2N modos. $\Rightarrow$ La densidad de estados tiene que integrar a 2N.

$$\Rightarrow \cancel{2}N = \int D_{ac}\, d\omega = \int_0^{\omega_D} \cancel{2}\,\frac{\omega S}{2\pi C^2}\, d\omega = \frac{\omega_D^2 S}{2 \cdot 2\pi C^2}$$

$$\Rightarrow \frac{S}{2\pi C^2} = \frac{2N}{\omega_D^2} \quad \Rightarrow \quad D_{ac} = 4N\,\frac{\omega}{\omega_D}\,\theta(\omega_D - \omega)$$

(*)

$$\Rightarrow D(\omega) = N\,\delta(\omega-\omega_1) + N\,\delta(\omega-\omega_2) + 4N\,\frac{\omega}{\omega_D}\,\theta(\omega_D-\omega)$$



$\omega_1, \omega_2 \gg \omega_D$

$$Q = \frac{d\tilde{E}}{dt} = \int \underbrace{D(\omega)}_{(*)}\, \frac{\hbar\omega}{(e^{\beta\hbar\omega}-1)}\, d\omega$$