

Estructura de la Materia 2

Primer Cuatrimestre - 2020

Guía 3 - Parte 3

En esta última parte de la guía 3 vamos a investigar cómo obtener las propiedades térmicas de un cristal a partir de la cuantización de sus modos de vibración. La cuantización de los modos de vibración consiste en asignar una ocupación de los estados de fonones de acuerdo a la estadística de bosones. En la teoría se mostró que en un cristal tridimensional de volumen V cada estado ocupa un volumen $\Delta \mathbf{k} = (2\pi)^3/V$ en el espacio recíproco. Para generalizar esto a una y dos dimensiones, reemplazamos el volumen por la longitud o área, respectivamente, y ajustamos el exponente a la dimensión del sistema, $d = 1, 2$. De esta manera, cada rama s (sin importar de qué tipo sea) contribuye al calor específico según

$$\begin{aligned} c_v^{(s)} &= \frac{\partial}{\partial T} u^{(s)} = \frac{1}{V} \frac{\partial}{\partial T} \sum_{\mathbf{k} \in \text{1ZB}} \frac{\hbar \omega_s(\mathbf{k})}{e^{\beta \hbar \omega_s(\mathbf{k})} - 1} \\ &\simeq \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\text{1ZB}} \frac{\partial}{\partial T} \frac{\hbar \omega_s(\mathbf{k})}{e^{\beta \hbar \omega_s(\mathbf{k})} - 1} d\mathbf{k} = \frac{k_B}{(2\pi)^d} \int_{\text{1ZB}} \frac{[\beta \hbar \omega_s(\mathbf{k})]^2 e^{\beta \hbar \omega_s(\mathbf{k})}}{[e^{\beta \hbar \omega_s(\mathbf{k})} - 1]^2} d\mathbf{k}, \end{aligned} \quad (1)$$

donde la aproximación se basa en pasar de la suma discreta a una integral continua en el límite de un número de átomos $N \rightarrow \infty$.

Dada la complejidad analítica de los cálculos para una relación de dispersión $\omega(\mathbf{k})$ arbitraria, recurriremos a una simplificación que consiste en considerar una relación de dispersión lineal $\omega(\mathbf{k}) = ck$ para las ramas acústicas, conocida como modelo de Debye. Bajo este modelo, las ramas ópticas se reemplazan por una extensión de las ramas acústicas por fuera de la primera zona de Brillouin. Alternativamente, puede proponerse una relación de dispersión constante $\omega(\mathbf{k}) = \omega_E$ para las ramas ópticas, conocida como modelo de Einstein.

Este tema se aborda en los **ejercicios 11-13**. A continuación desarrollaremos un ejemplo que tiene elementos en común con estos tres ejercicios, que les servirá de referencia para resolverlos.

Ejemplo 1D

Tomemos como ejemplo la cadena unidimensional de la figura 1, con masas M , parámetro de red a y constantes elásticas alternadas C y G . La relación de dispersión de fonones para cada rama de este sistema fue calculada en la teoría (clase 5), los resultados se reproducen en la figura 2.

Aquí asumiremos además que $G \ll C$ (no es necesario, pero simplifica las expresiones), de

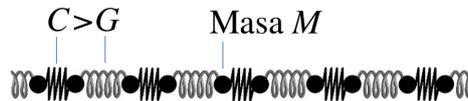


Figura 1: Cadena unidimensional monoatómica con constantes elásticas alternadas.

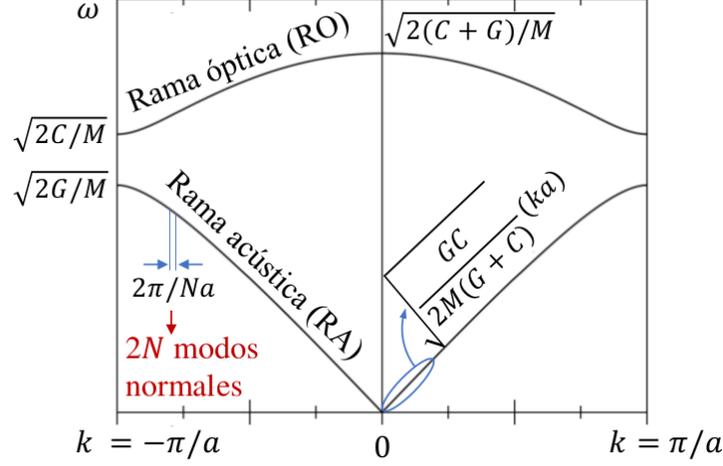


Figura 2: Relación de dispersión de fonones para el sistema de la figura 1.

forma que la relación de dispersión obtenida pueda aproximarse por

$$\begin{aligned}\omega^{\text{RA}} &= \sqrt{\frac{C+G}{M} - \frac{1}{M}\sqrt{C^2 + G^2 + 2CG \cos(ka)}} \simeq \underbrace{\sqrt{\frac{G}{2M}}}_{c} ak \quad \text{para } k \ll \pi/a \\ \omega^{\text{RO}} &= \sqrt{\frac{C+G}{M} + \frac{1}{M}\sqrt{C^2 + G^2 + 2CG \cos(ka)}} \simeq \underbrace{\sqrt{\frac{2C+G}{M}}}_{\omega_E}.\end{aligned}\quad (2)$$

Si ahora particularizamos la ec. (1) para una dimensión, bajo el modelo de Debye-Einstein, y siguiendo las sustituciones hechas en la teórica, nos queda

$$\begin{aligned}c_v^{\text{RA}} &= \frac{k_B}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{(\beta \hbar c |k|)^2 e^{\beta \hbar c |k|}}{[e^{\beta \hbar c |k|} - 1]^2} dk \\ &= \frac{k_B}{2\pi} \frac{2}{\beta \hbar c} \int_0^{\pi/a} \frac{(\beta \hbar c k)^2 e^{\beta \hbar c k}}{[e^{\beta \hbar c k} - 1]^2} d(\beta \hbar c k) \\ &= \frac{k_B}{a} \frac{T}{\Theta_D} \int_0^{\Theta_D/T} \frac{x^2 e^x}{(e^x - 1)^2} dx, \quad \Theta_D = \frac{\hbar c \pi}{k_B a} = \frac{\hbar \pi}{k_B} \sqrt{\frac{G}{2M}}\end{aligned}\quad (3)$$

para la rama acústica, y

$$\begin{aligned}c_v^{\text{RO}} &= \frac{k_B}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{(\beta \hbar \omega_E)^2 e^{\beta \hbar \omega_E}}{[e^{\beta \hbar \omega_E} - 1]^2} dk \\ &= \frac{k_B}{2\pi} \frac{2\pi}{a} \frac{(\beta \hbar \omega_E)^2 e^{\beta \hbar \omega_E}}{[e^{\beta \hbar \omega_E} - 1]^2} \\ &= \frac{k_B}{a} \left(\frac{\Theta_E}{T}\right)^2 \frac{e^{\Theta_E/T}}{[e^{\Theta_E/T} - 1]^2}, \quad \Theta_E = \frac{\hbar \omega_E}{k_B} = \frac{\hbar}{k_B} \sqrt{\frac{2C+G}{M}}\end{aligned}\quad (4)$$

para la rama óptica.

Comparando con los resultados obtenidos para el caso 3D, se ve que la dependencia del c_v de la rama acústica, a bajas temperaturas ($\Theta_D/T \rightarrow \infty$) es ahora

$$c_v^{\text{RA}} \simeq \frac{k_B}{a} \frac{T}{\Theta_D} \int_0^\infty \frac{x^2 e^x}{(e^x - 1)^2} dx \propto T \quad (5)$$

es decir, resulta lineal con la temperatura. Si repitiéramos el cálculo en 2D, obtendríamos una dependencia cuadrática. Cualitativamente, podemos graficar el c_v correspondiente a la rama acústica para ambos casos como se muestra en la figura 3. Para esto solo tomamos en cuenta los límites de baja temperatura descritos y la ley de Petit-Dulong para el límite asintótico de alta temperatura.

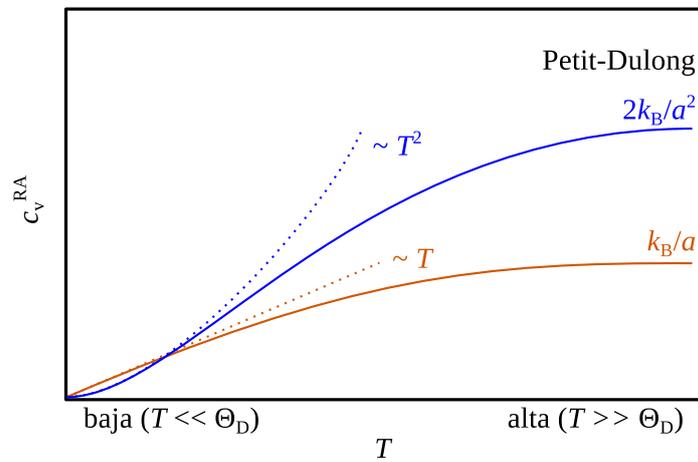


Figura 3: Gráfico cualitativo del calor específico bajo el modelo de Debye para la rama acústica de un sistema unidimensional (naranja) y bidimensional (azul).