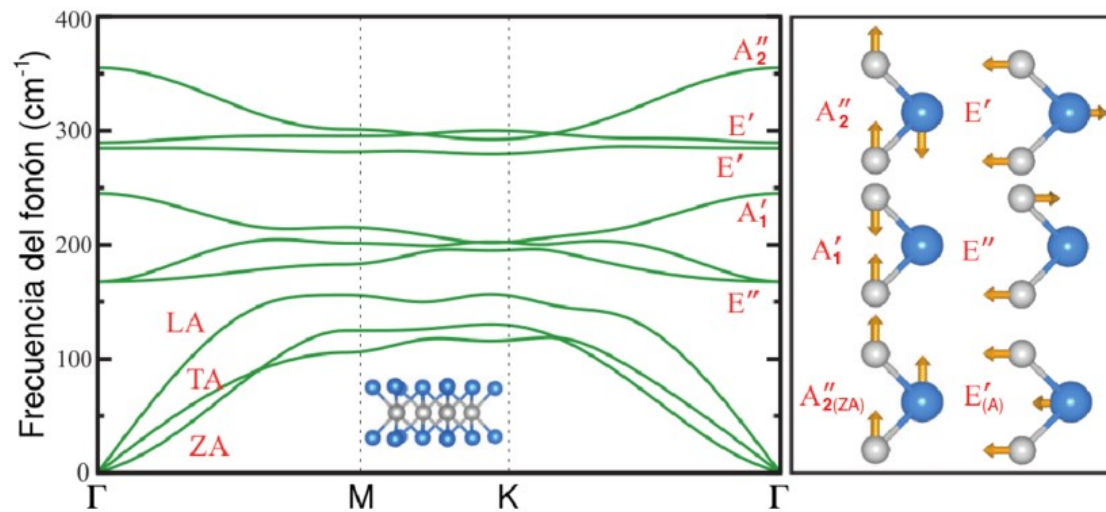
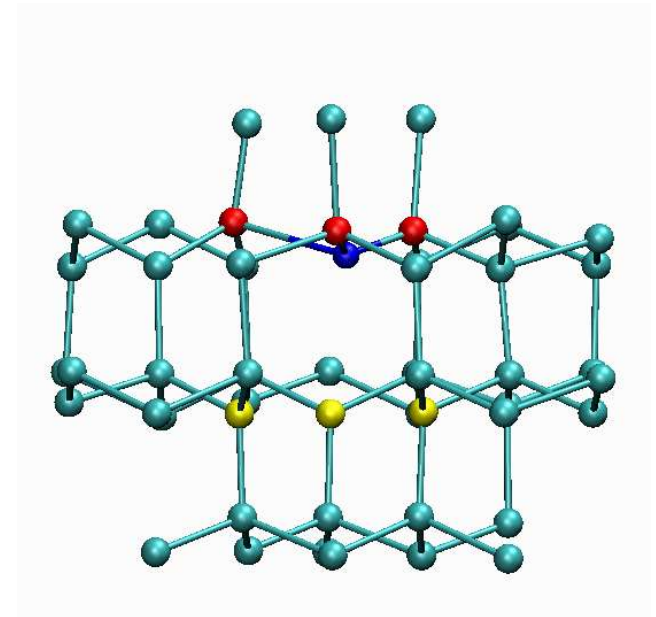
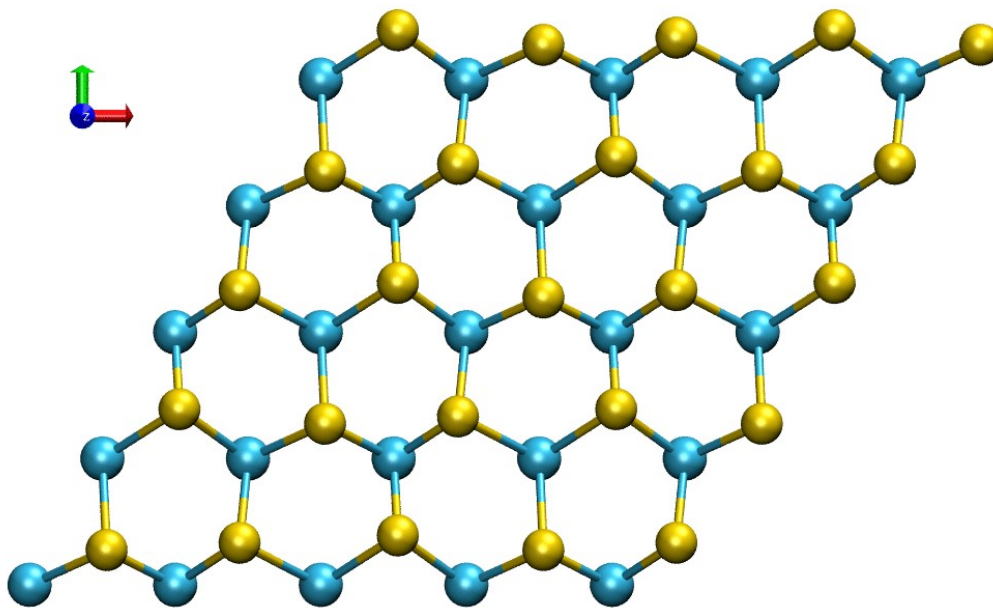


Capítulo 4: Dinámica de la red – Fonones



Fallas de la aproximación estática para el cristal

□ Propiedades térmicas del equilibrio:

✓ Calor específico:

Las vibraciones de la red son la principal causa de absorción de calor y dan cuenta del calor específico observado tanto de metales como de aisladores.

✓ Expansión térmica:

Las vibraciones (anharmónicas) hacen que el volumen del sólido dependa de la temperatura.

✓ Fusión:

Un sólido se funde cuando el valor cuadrático medio de la posición de un átomo es una cierta fracción del espaciado interatómico (criterio de Linderman 1910)

Fallas de la aproximación estática: Interacción con la radiación

❑ Interacción con la radiación:

✓ Reflectividad de los cristales iónicos:

Tiene un máximo en frecuencias del infrarrojo que no corresponde a energías electrónicas sino a las fluctuaciones en el momento dipolar creado por las vibraciones iónicas.

✓ Dispersión inelástica de Luz:

La luz laser dispersada por el sólido tienen un corrimiento en frecuencia (Raman).

✓ Dispersión de Rayos X:

La intensidad de los picos es menor que la predicha por un modelo estático. Además hay un fondo de radiación en direcciones que no satisfacen la ley de Bragg.

✓ Dispersión de inelástica de neutrones:

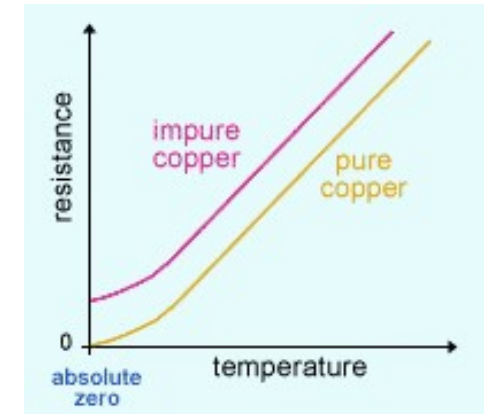
Intercambian energía y momento con las vibraciones

Fallas de la aproximación estática: transporte

□ Propiedades de transporte:

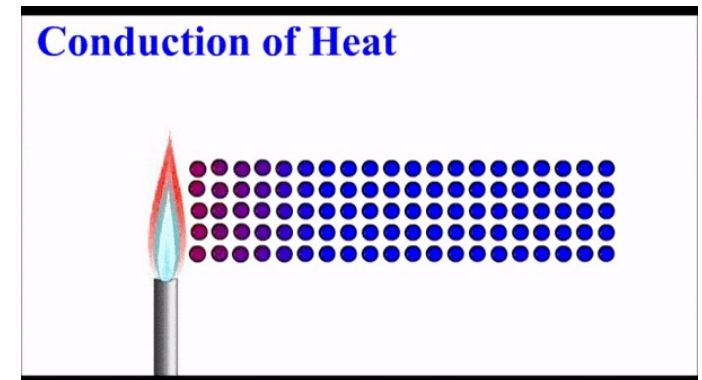
✓ La resistividad de los metales:

La dependencia de la resistividad con la temperatura $\rho(T)$ se debe esencialmente a la interacción de los electrones con las vibraciones de la red (fonones).



✓ Conductividad térmica de aisladores:

Se debe al intercambio de fonones desde el extremo caliente al frío.



✓ Transmisión del sonido

Fallas de la aproximación estática: transporte

✓ Superconductividad (Onnes 1911)

Se debe a la interacción electrón-fonón (BCS 1957)

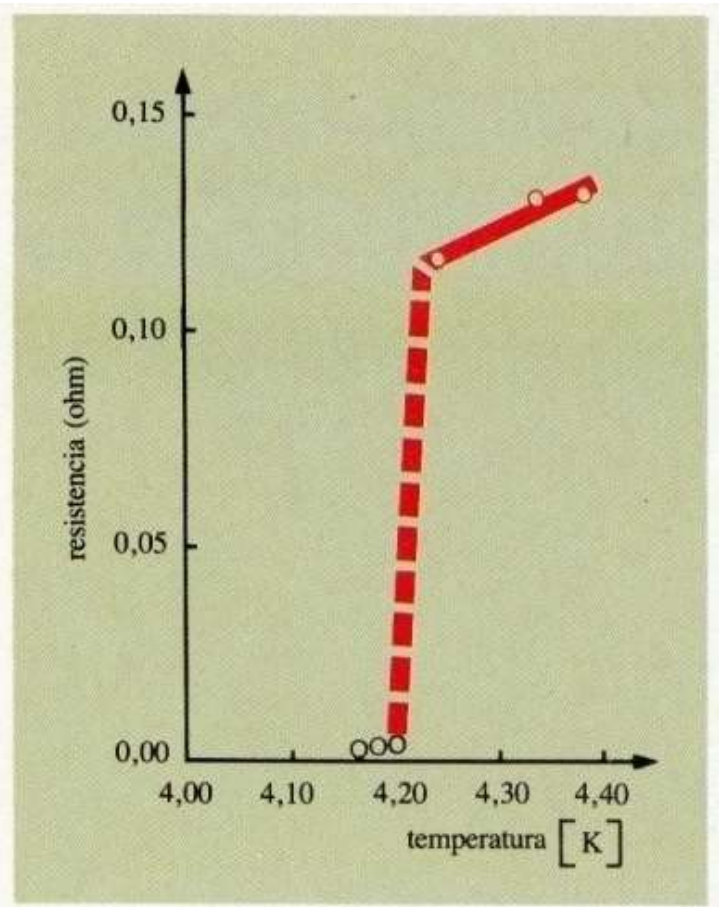
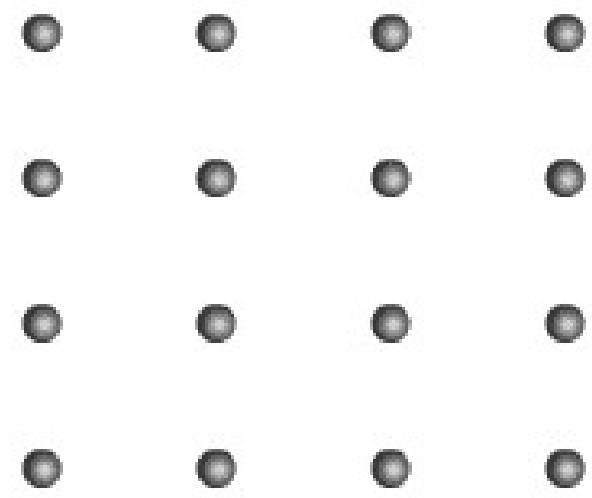
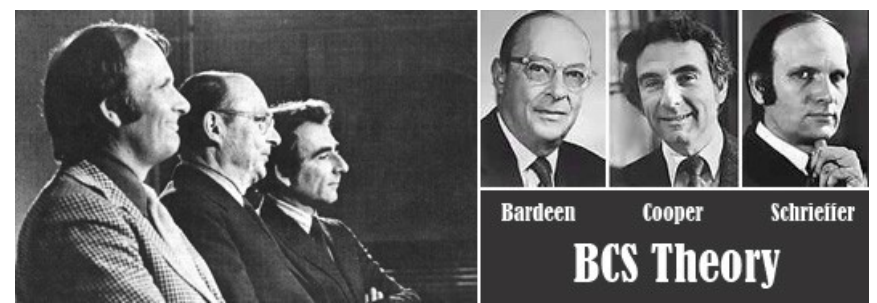


Fig. 1. El fenómeno de la superconductividad, para el caso del mercurio, descubierto por Kamerlingh Onnes en 1911. Por debajo de una temperatura crítica la resistencia del conductor es nula. (De C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*.)

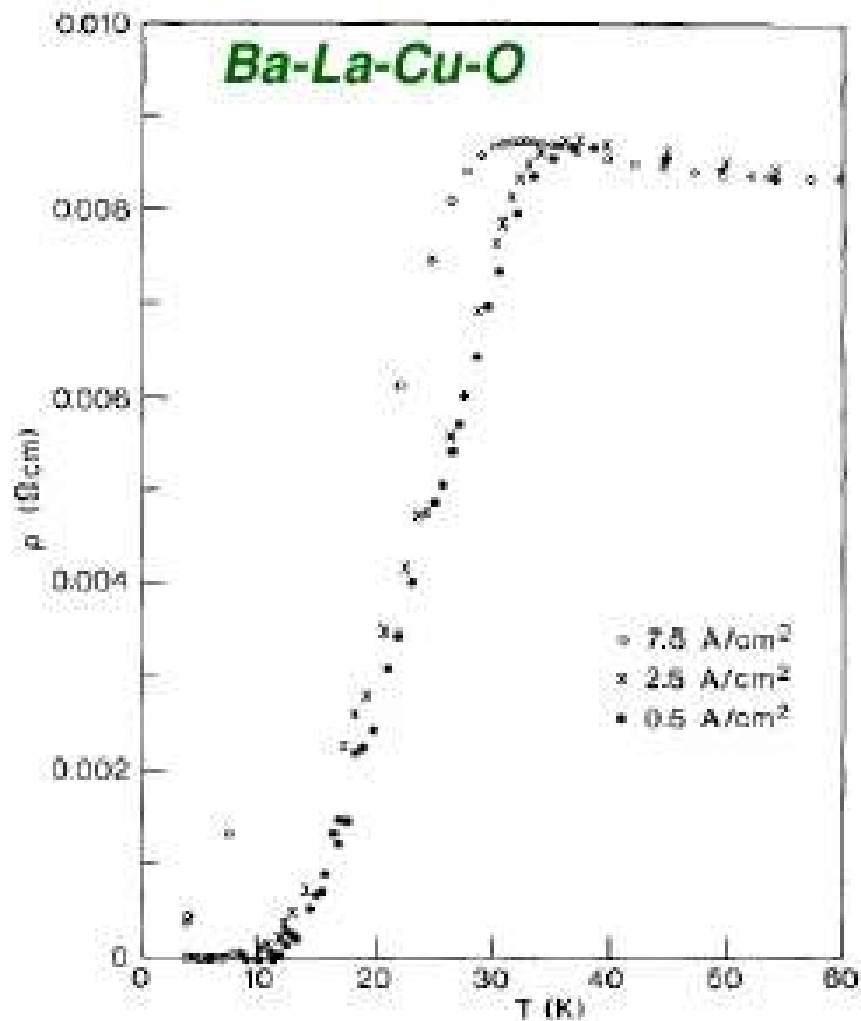


Superconductividad

H																	He
Li	Be 0.03											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al 1.19	Si 6.7	P 4.6–6.1	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti 0.39	V 5.3	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn 0.9	Ga 1.09	Ge 5.4	As 0.5	Se 6.9	Br	Kr
Rb	Sr	Y 0.5–2.7	Zr 0.55	Nb 9.2	Mo 0.92	Tc 7.8	Ru 0.5	Rh 325 μ	Pd	Ag	Cd 0.55	In 3.4	Sn 3.7;5.3	Sb 3.6	Te 4.5	I	Xe
Cs 1.5	Ba 1.8;5.1	La 4.8;5.9	Hf	Ta 4.4	W 0.01	Re 1.7	Os 0.65	Ir 0.14	Pt	Au	Hg 4.15 3.95	Tl 2.39 1.45	Pb 7.2	Bi 3.9 7.2;8.5	Po	At	Rn
Fr	Ra	Ac	Ce 1.7	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu 0.1–0.7	
			Th 1.37	Pa 1.3	U 0.2	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lw	

Fig. 10.2. The periodic table of the elements showing known superconductors (*shaded*) and their transition temperatures T_c (in [K]). Dark shading means that only a high pressure phase of the element is superconducting

Superconductividad



Ba-La-Cu-O compound:
J. G. Bednorz, K. A. Müller, Z.
Physik, B 64 (1986) 189

Possible High T_c Superconductivity in the Ba – La – Cu – O System

J.G. Bednorz and K.A. Müller
IBM Zürich Research Laboratory, Rüschlikon, Switzerland

Received April 17, 1986

Superconductores de alta T_c

Superconductividad

Ceramics: layered perovskite material (2-dimensionality)

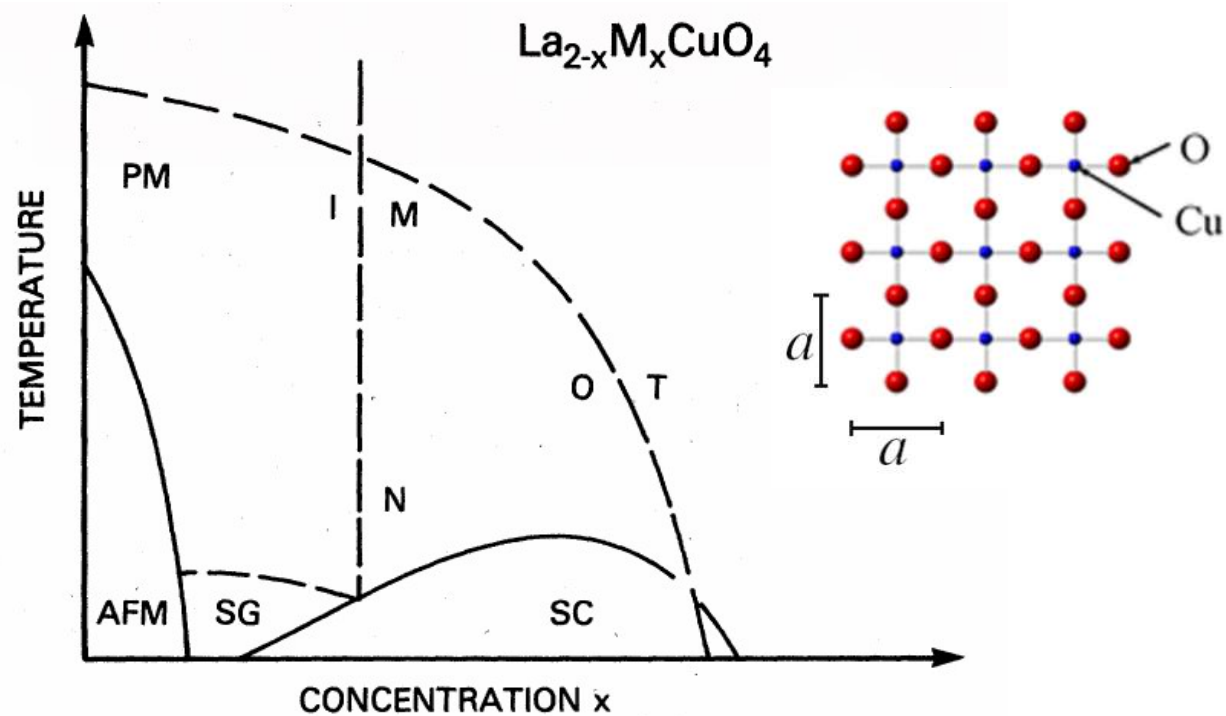
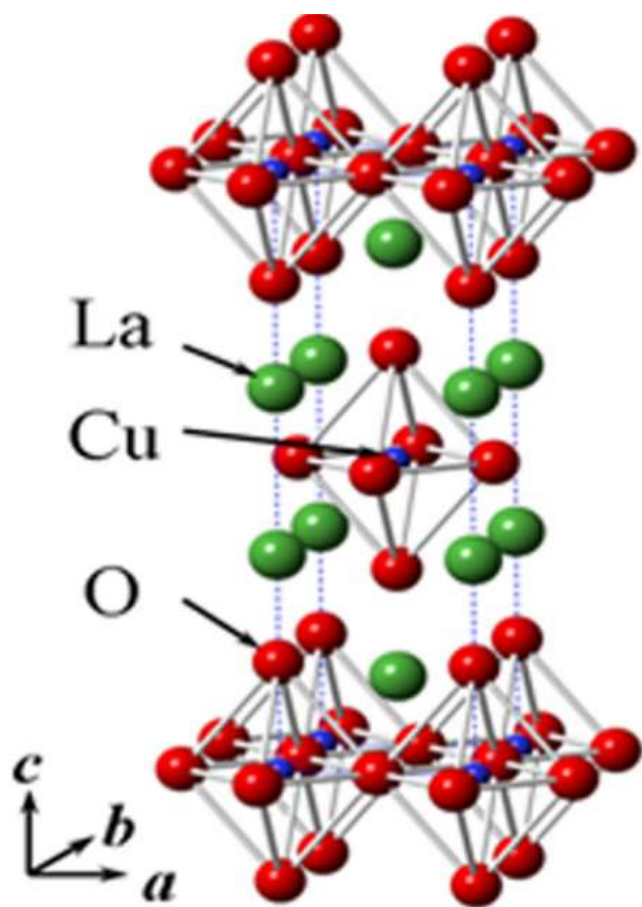
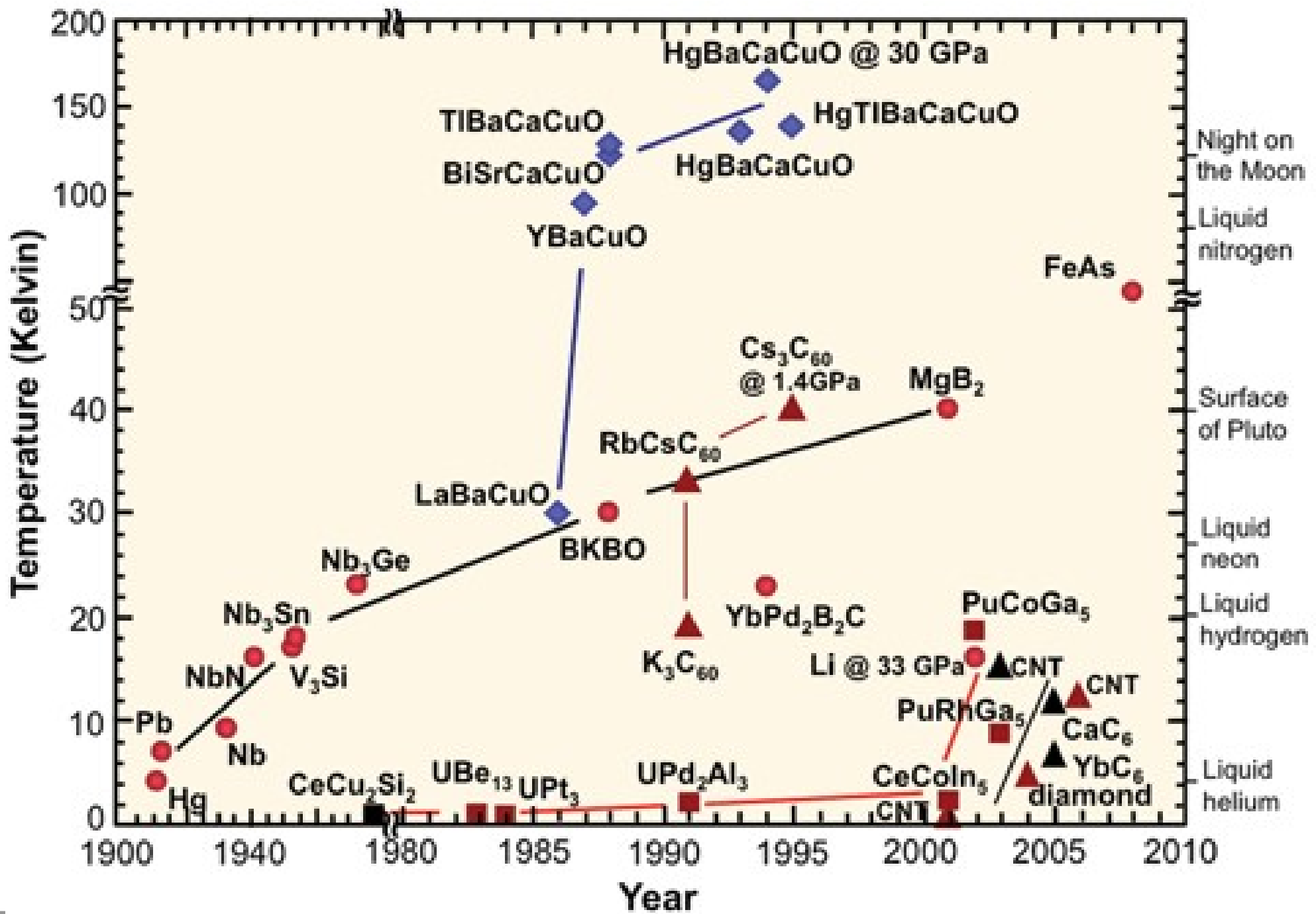


FIG. 1. Schematic phase diagram for $\text{La}_{2-x}\text{M}_x\text{CuO}_4$, $M = \text{Sr}$ or Ba , in the temperature-concentration (x) plane. AFM = antiferromagnetic, PM = paramagnetic, I = insulating, M = metallic, SG = spin-glass, N = normal, SC = superconducting, T = tetragonal, O = orthorhombic. A closely related phase diagram is applicable to the $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ system.

Superconductividad

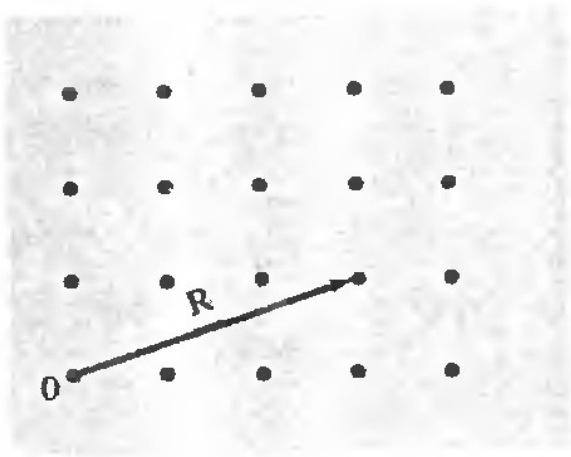


La aproximación armónica

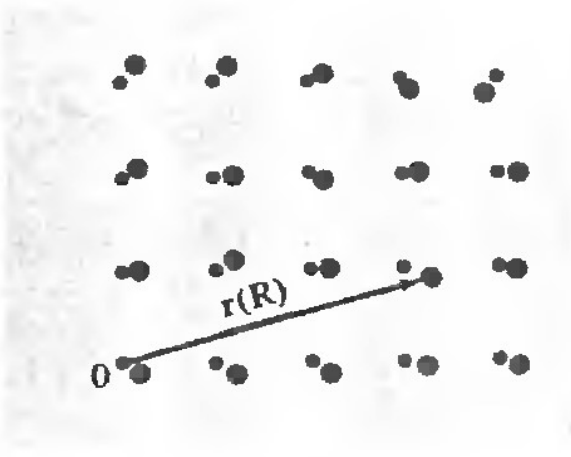
$$\mathbf{r}(\mathbf{R}) = \mathbf{R} + \mathbf{u}(\mathbf{R});$$

Desviación de la posición de equilibrio

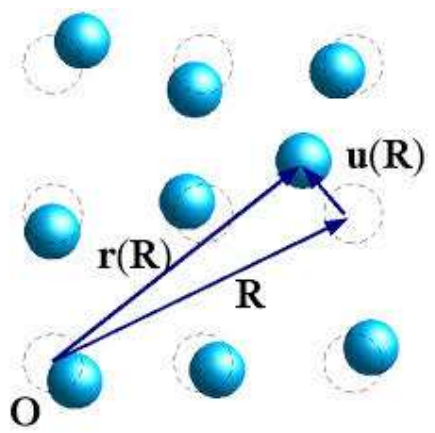
Posición de un átomo cuya posición media es el vector de la RB



(a)



(b)



Si las interacciones son debidas a un potencial $\phi(r)$. que actúa entre pares de átomos a distancia r . La energía potencial del cristal se escribe como:

$$U = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{R}\mathbf{R}'} \phi(\mathbf{r}(\mathbf{R}) - \mathbf{r}(\mathbf{R}')) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{R}\mathbf{R}'} \phi(\mathbf{R} - \mathbf{R}' + \mathbf{u}(\mathbf{R}) - \mathbf{u}(\mathbf{R}')).$$

La aproximación armónica

Si los $u(\mathbf{R})$ son chicos podemos expandir alrededor de la posición de equilibrio usando Taylor en varias variables:

$$f(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = f(\mathbf{r}) + \mathbf{a} \cdot \nabla f(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} (\mathbf{a} \cdot \nabla)^2 f(\mathbf{r}) + \frac{1}{3!} (\mathbf{a} \cdot \nabla)^3 f(\mathbf{r}) + \dots$$

Tomando $\mathbf{r} = \mathbf{R} - \mathbf{R}'$ y $\mathbf{a} = u(\mathbf{R}) - u(\mathbf{R}')$ en U , tenemos:

$$U = \frac{N}{2} \sum \phi(\mathbf{R}) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{R}\mathbf{R}'} (u(\mathbf{R}) - u(\mathbf{R}')) \cdot \nabla \phi(\mathbf{R} - \mathbf{R}') + \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{R}\mathbf{R}'} [(u(\mathbf{R}) - u(\mathbf{R}')) \cdot \nabla]^2 \phi(\mathbf{R} - \mathbf{R}') + O(u^3).$$

Energía potencial en posiciones de equilibrio

U^{harm} Energía potencial armónica

$\sum_{\mathbf{R}'} \nabla \phi(\mathbf{R} - \mathbf{R}')$. (Fuerza ejercida sobre un átomo por los otros)=0

La aproximación armónica

$$U^{\text{harm}} = \frac{1}{4} \sum_{\substack{\mathbf{R}\mathbf{R}' \\ \mu, \nu = x, y, z}} [u_{\mu}(\mathbf{R}) - u_{\mu}(\mathbf{R}')] \phi_{\mu\nu}(\mathbf{R} - \mathbf{R}') [u_{\nu}(\mathbf{R}) - u_{\nu}(\mathbf{R}')].$$

Ejercicio

$$\phi_{\mu\nu}(\mathbf{r}) = \frac{\partial^2 \phi(\mathbf{r})}{\partial r_{\mu} \partial r_{\nu}} \quad \mathbf{r} = \mathbf{R} - \mathbf{R}'$$

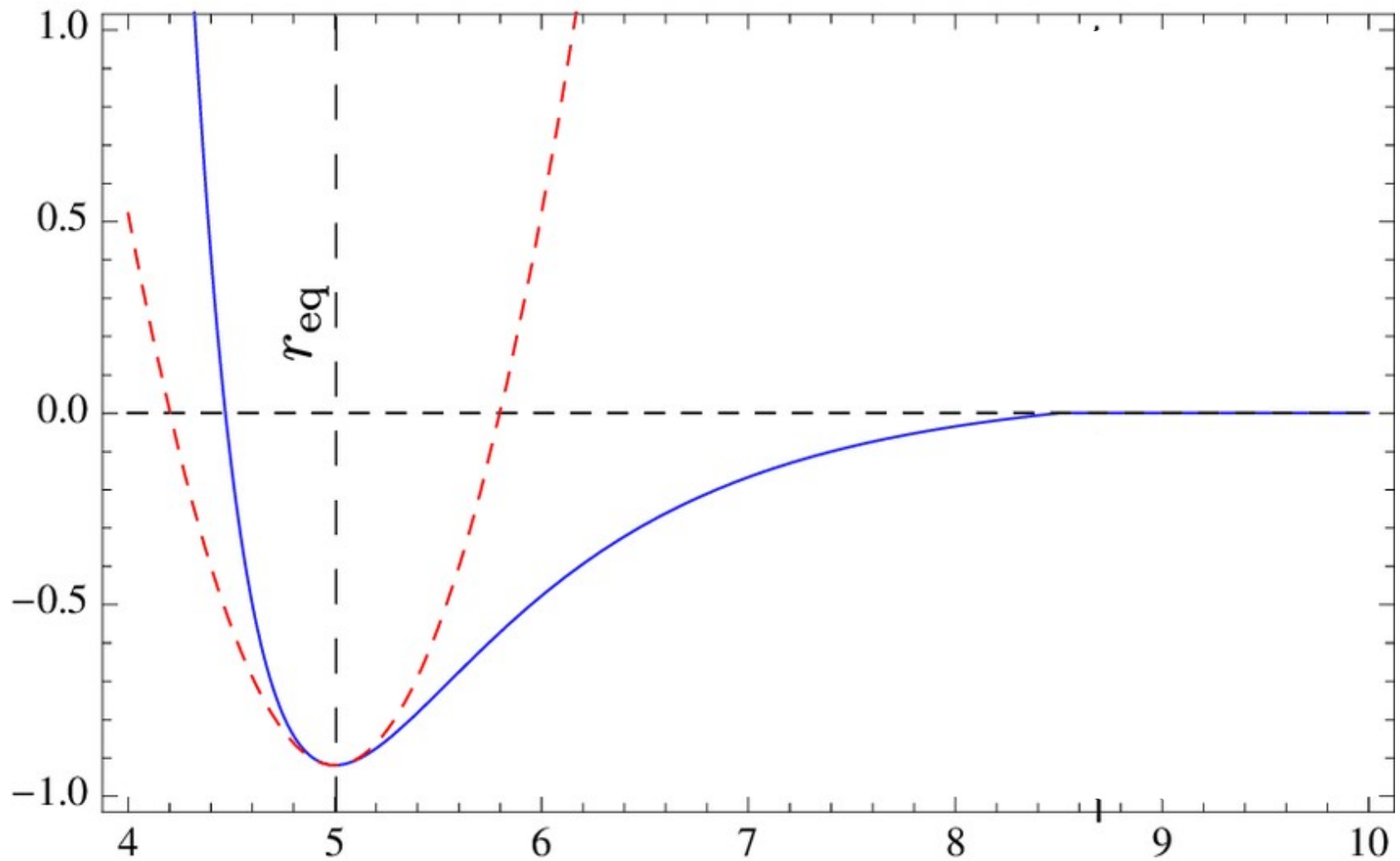
$$= \frac{1}{2} \sum_{\substack{\mathbf{R}\mathbf{R}' \\ \mu\nu}} u_{\mu}(\mathbf{R}) D_{\mu\nu}(\mathbf{R} - \mathbf{R}') u_{\nu}(\mathbf{R}').$$

$$D_{\mu\nu}(\mathbf{R} - \mathbf{R}') = \delta_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} \sum_{\mathbf{R}''} \phi_{\mu\nu}(\mathbf{R} - \mathbf{R}'') - \phi_{\mu\nu}(\mathbf{R} - \mathbf{R}').$$

Fuerza en la dirección ν sobre el átomo \mathbf{R}' que ejerce el átomo \mathbf{R} al moverse en la dirección μ

La aproximación armónica

$$U^{\text{harm}} = \frac{1}{2} K \sum_n [u(na) - u([n + 1]a)]^2$$



La aproximación adiabática

✓ Para un sólido general, el potencial no puede representarse como una suma de potenciales de a pares.

✓ La fuerza entre átomos proviene de la deformación de la estructura electrónica producida por el desplazamiento iónico.

✓ Aproximación adiabática: La estructura electrónica se deforma instantáneamente siguiendo la deformación iónica ($m_{\text{ión}} \gg m_{\text{electrón}}$)

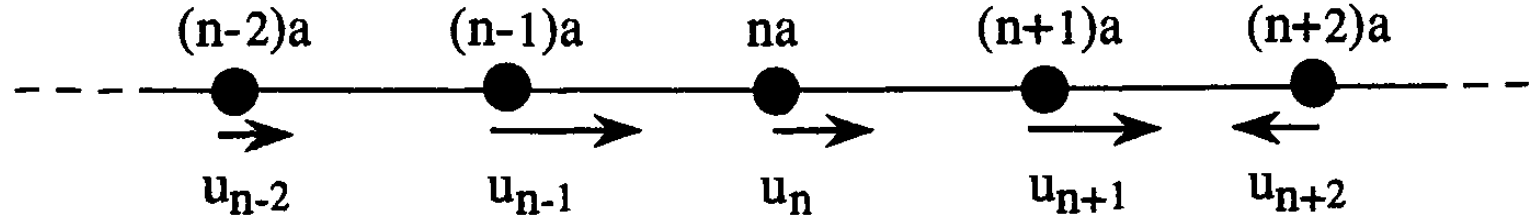
$$v_{\text{ión}} \sim 10^5 \text{ cm/s} \ll v_{\text{electrón}} = v_F \sim 10^8 \text{ cm/s}$$

✓
$$U^{\text{harm}} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\mathbf{R}\mathbf{R}' \\ \mu\nu}} u_{\mu}(\mathbf{R}) D_{\mu\nu}(\mathbf{R} - \mathbf{R}') u_{\nu}(\mathbf{R}').$$
 se toma como punto de partida

Los coeficientes $D_{\mu\nu}(\mathbf{R} - \mathbf{R}')$ se ajustan a experimentos o a cálculos de la estructura electrónica

Paso a paso: Cadena Monoatómica

Empecemos por el ejemplo más simple de una cadena monoatómica con interacciones sólo a primeros vecinos (ej.: Lennard-Jones)



$$E_0(\{u_n\}) = E_0(0) + \frac{1}{2} \sum_{nn'} \left(\frac{\partial^2 E_0}{\partial u_n \partial u_{n'}} \right)_0 u_n u_{n'} + \frac{1}{3!} \sum_{nn'n''} \left(\frac{\partial^3 E_0}{\partial u_n \partial u_{n'} \partial u_{n''}} \right)_0 u_n u_{n'} u_{n''} + \dots$$

Términos anarmónicos

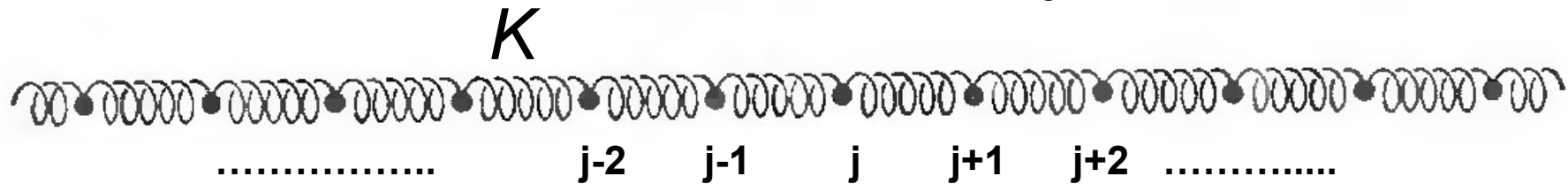
$$E_0^{(\text{harm})}(\{u_n\}) = E_0(0) + \frac{1}{2} \sum_{nn'} D_{nn'} u_n u_{n'} , \quad \longrightarrow \quad D_{nn'} = \left(\frac{\partial^2 E_0}{\partial u_n \partial u_{n'}} \right)_0$$

$$F_n = - \frac{\partial E_0^{(\text{harm})}}{\partial u_n} = - \sum_{n'} D_{nn'} u_{n'} . \quad D_{nn'} = D_{n'n} \quad \sum_{n'} D_{nn'} \equiv 0$$

Cadena Monoatómica

Un análogo mecánico es:

$$U^{\text{harm}} = \frac{1}{2} K \sum_j [u(ja) - u(j+1)a]^2$$



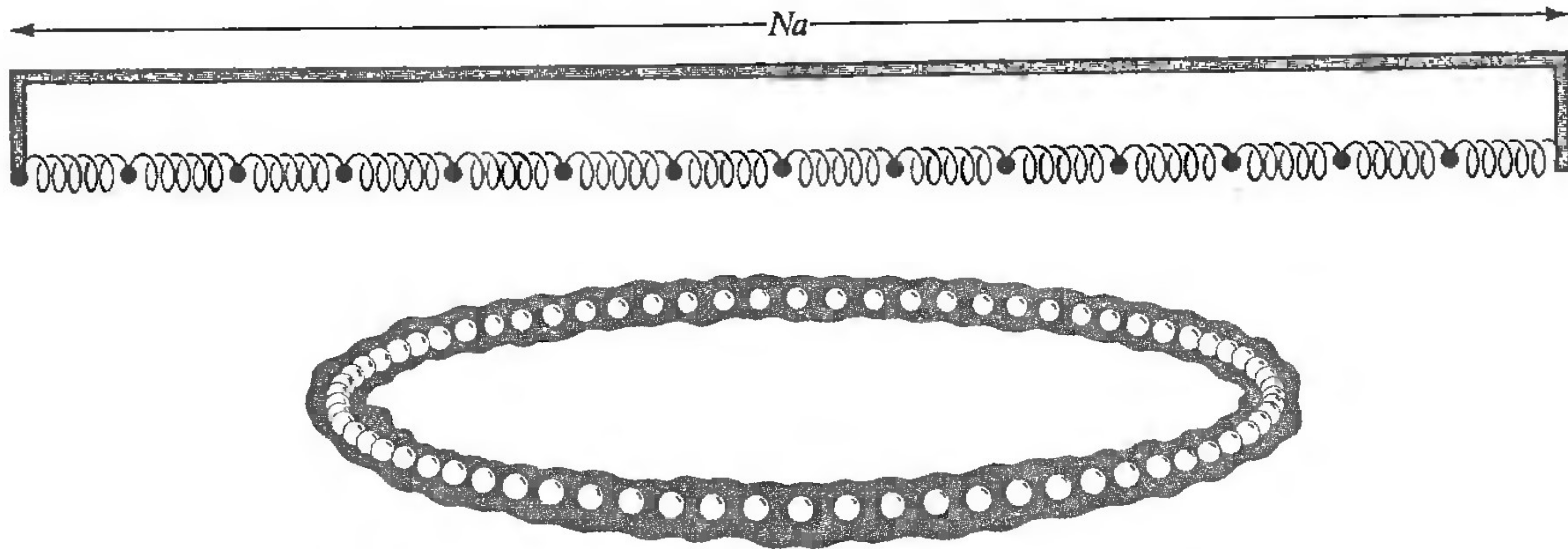
Con ecuaciones de movimiento:

$$M\ddot{u}(na) = - \frac{\partial U^{\text{harm}}}{\partial u(na)} = - K[2u(na) - u([n-1]a) - u([n+1]a)].$$

Si la cadena es muy larga lo que pase en los bordes no afectará al interior, tomamos como condiciones de contorno las periódicas ya que no rompen la invariancia de traslación.

$$u([N+1]a) = u(a); \quad u(0) = u(Na).$$

Cadena Monoatómica



Proponemos soluciones de la forma $u(na, t) \propto e^{i(kna - \omega t)}$,
con las condiciones periódicas

$$e^{ikNa} = 1 \Rightarrow k = \frac{2\pi n}{a N}, \quad n \text{ entero}$$

Reemplazando en las ecuaciones de movimiento:

$$\begin{aligned} -M\omega^2 e^{i(kna - \omega t)} &= -K[2 - e^{-ika} - e^{ika}]e^{i(kna - \omega t)} \\ &= -2K(1 - \cos ka)e^{i(kna - \omega t)}, \end{aligned}$$

Cadena Monoatómica

Esto determina una relación entre ω y k (**relación de dispersión**):

$$\omega(k) = \sqrt{\frac{2K(1 - \cos ka)}{M}} = 2 \sqrt{\frac{K}{M}} \left| \sin \frac{1}{2}ka \right|.$$

Los movimientos de las partículas estarán dados por:

$$u(na, t) \propto \begin{cases} \cos (kna - \omega t) \\ \sin (kna - \omega t) \end{cases}$$

Ahora k no puede tomar cualquier valor (además de su discretización) porque dos soluciones con k_1 y k_2 que solo difieren en $2\pi/a$ representan en realidad la misma dinámica de las partículas.

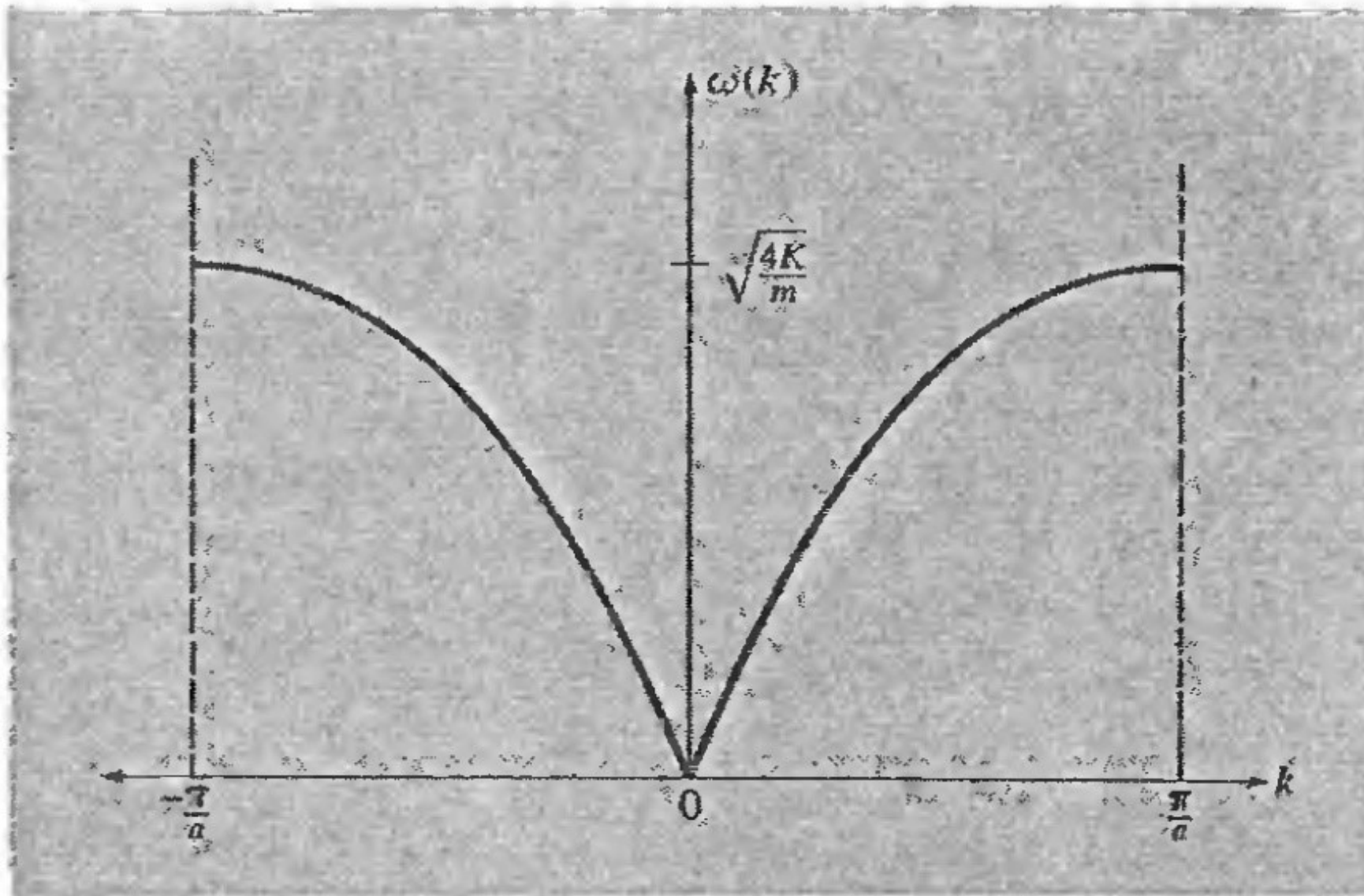
El rango de valores independientes de k es

$$-\frac{\pi}{a} < k \leq \frac{\pi}{a}, \quad k = \frac{2\pi}{a} \frac{n}{N}, \quad -N/2 < n < N/2$$

**n° k en la
1ZB = N**

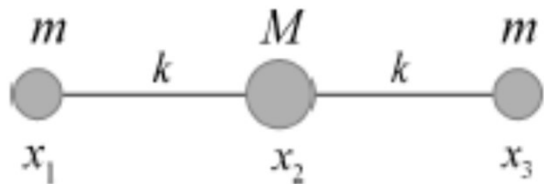
Cadena Monoatómica

Podemos restringir $-\pi/a < k < \pi/a$, primera zona de Brillouin.

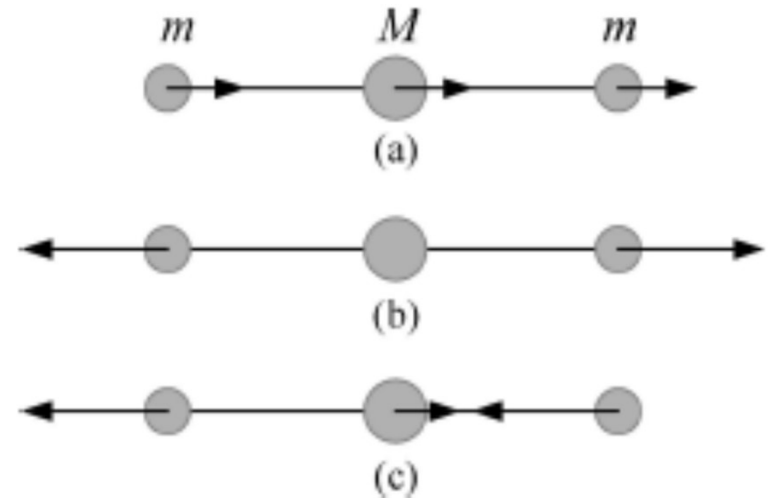


Cadena Monoatómica

Recordar los modos normales de vibración de una molécula triatómica lineal (Mecánica Clásica de Goldstein)



$$\omega_1 = 0, \quad \omega_2 = \sqrt{\frac{k}{m}}, \quad \omega_3 = \sqrt{\frac{k}{m} \left(1 + \frac{2m}{M}\right)}.$$

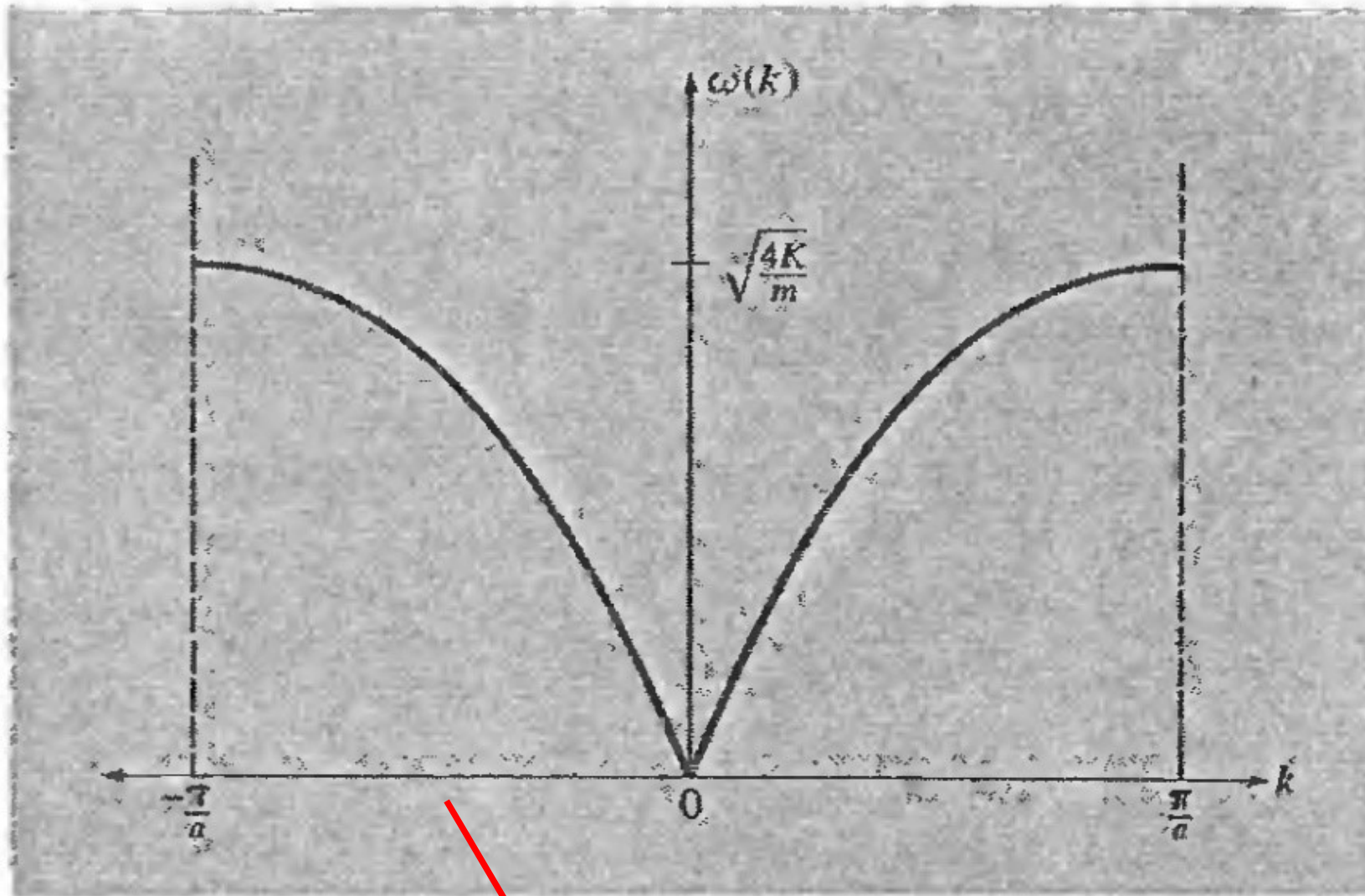


Molécula de H₂O



Cadena Monoatómica

Modos Normales de vibración de la cadena monoatómica

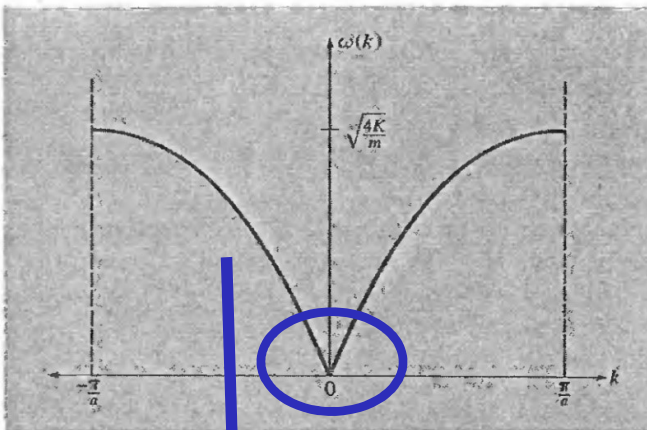


N átomos \Rightarrow N puntos k en 1ZB \Rightarrow N modos normales $\omega(k)$

Cadena Monoatómica

$$u(na, t) \propto e^{i(kna - \omega t)}$$

$$\omega(k) = \sqrt{\frac{2K(1 - \cos ka)}{M}}$$



**Rama
acústica**

$$k = 6\pi/6a \quad \lambda = 2.00a \quad \omega_k = 2.00\omega$$



$$k = 5\pi/6a \quad \lambda = 2.40a \quad \omega_k = 1.93\omega$$



$$k = 4\pi/6a \quad \lambda = 3.00a \quad \omega_k = 1.73\omega$$



$$k = 3\pi/6a \quad \lambda = 4.00a \quad \omega_k = 1.41\omega$$



$$k = 2\pi/6a \quad \lambda = 6.00a \quad \omega_k = 1.00\omega$$



$$k = 1\pi/6a \quad \lambda = 12.00a \quad \omega_k = 0.52\omega$$



Cadena Monoatómica

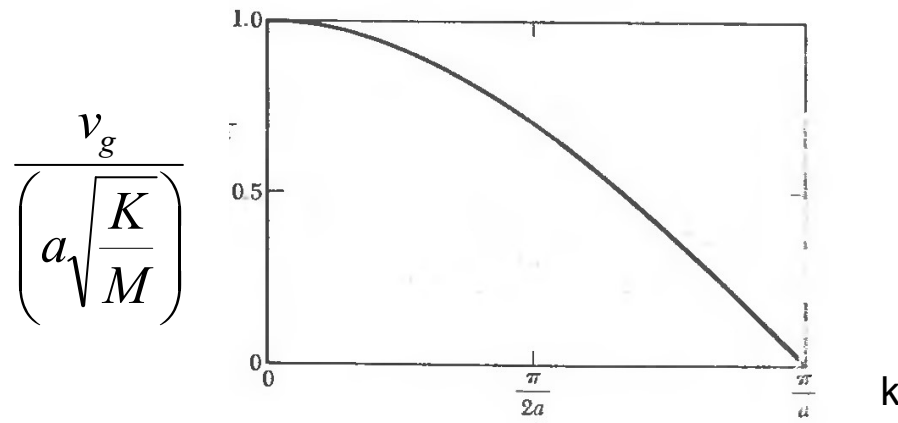
Cuando k es chico la relación de dispersión se hace lineal

$$\cos Ka \cong 1 - \frac{1}{2}(Ka)^2 \implies \omega = \left(a \sqrt{\frac{K}{M}} \right) |k|$$

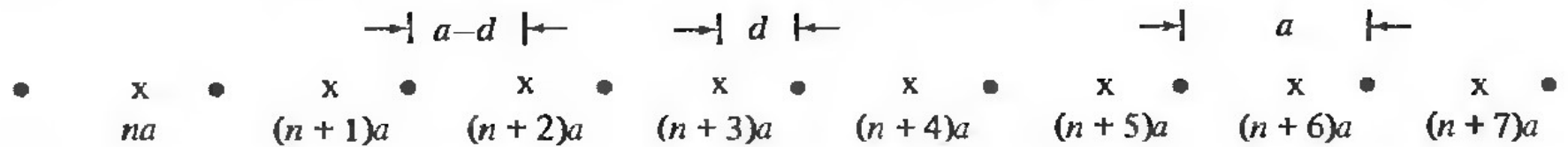
Corresponde a ondas en un medio continuo. No hay dispersión \implies la velocidad de grupo $\partial\omega/\partial k$ y de fase ω/k son iguales y dan la velocidad del sonido en el medio


$$v_s = \left(a \sqrt{\frac{K}{M}} \right)$$

En $k=\pi/a$ la velocidad de grupo se anula \implies ondas estacionarias

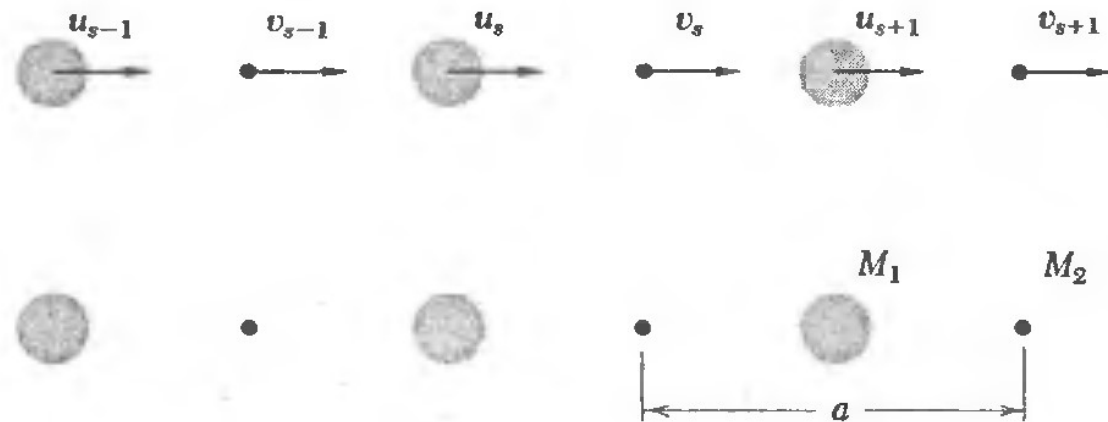


Cadena Diatómica



 G -spring

 K -spring



$$U^{\text{harm}} = \frac{K}{2} \sum_n [u_1(na) - u_2(na)]^2 + \frac{G}{2} \sum_n [u_2(na) - u_1([n+1]a)]^2,$$

Cadena Diatómica

$$\begin{aligned} M\ddot{u}_1(na) &= -\frac{\partial U^{\text{harm}}}{\partial u_1(na)} \\ &= -K[u_1(na) - u_2(na)] - G[u_1(na) - u_2((n-1)a)], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} M\ddot{u}_2(na) &= -\frac{\partial U^{\text{harm}}}{\partial u_2(na)} \\ &= -K[u_2(na) - u_1(na)] - G[u_2(na) - u_1((n+1)a)]. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} u_1(na) &= \epsilon_1 e^{i(kna - \omega t)}, \\ u_2(na) &= \epsilon_2 e^{i(kna - \omega t)}. \end{aligned}$$

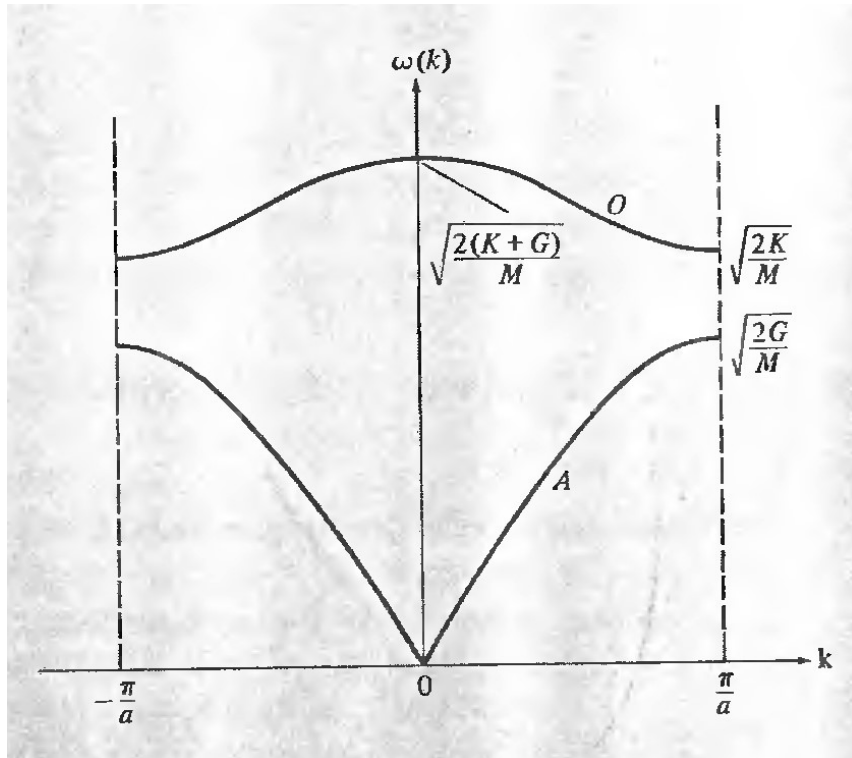
$$\begin{aligned} [M\omega^2 - (K + G)]\epsilon_1 + (K + Ge^{-ika})\epsilon_2 &= 0, \\ (K + Ge^{ika})\epsilon_1 + [M\omega^2 - (K + G)]\epsilon_2 &= 0. \end{aligned}$$

$$[M\omega^2 - (K + G)]^2 = |K + Ge^{-ika}|^2 = K^2 + G^2 + 2KG \cos ka.$$

$$\omega^2 = \frac{K + G}{M} \pm \frac{1}{M} \sqrt{K^2 + G^2 + 2KG \cos ka}$$

$$\frac{\epsilon_2}{\epsilon_1} = \mp \frac{K + Ge^{ika}}{|K + Ge^{ika}|}.$$

Cadena Diatómica

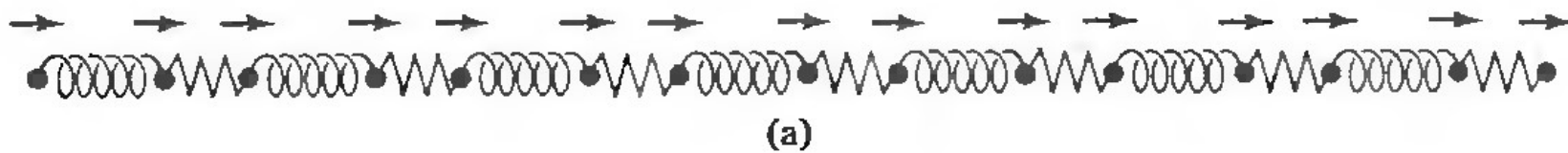


$$k \ll \pi/a$$

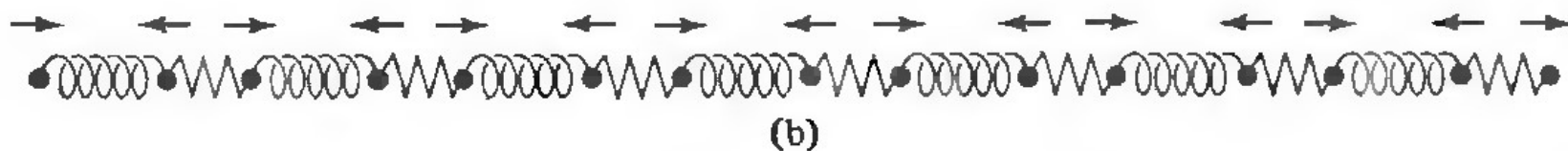
$$\omega = \sqrt{\frac{2(K+G)}{M}} - O(ka)^2,$$

$$\omega = \sqrt{\frac{KG}{2M(K+G)}} (ka).$$

$$\epsilon_2 = \mp \epsilon_1$$



Modo
acústico



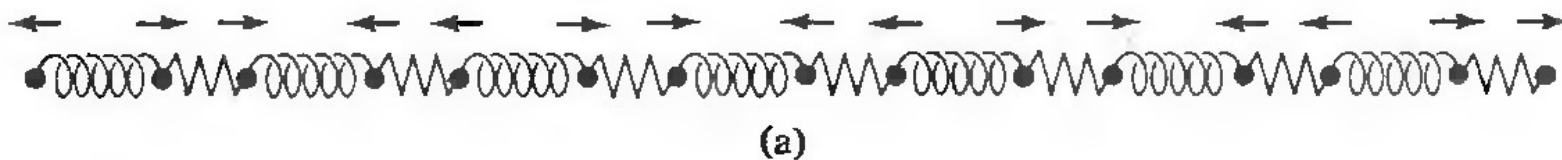
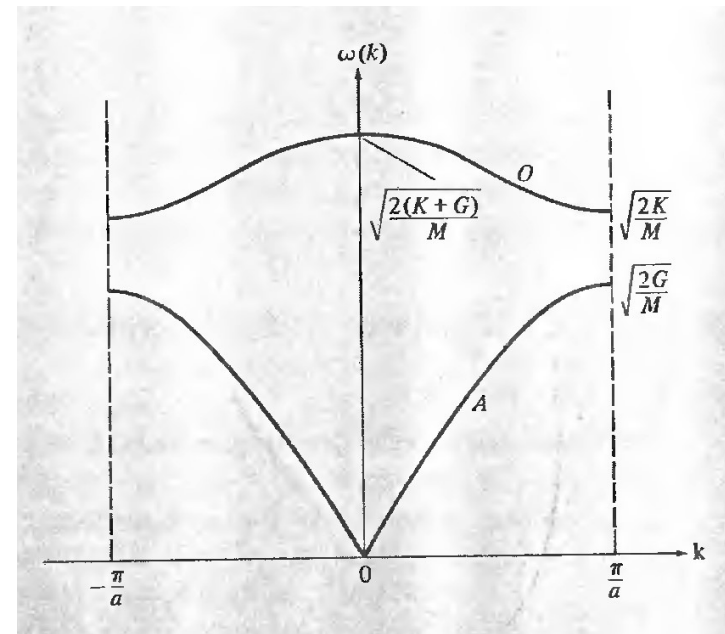
Modo
óptico

Cadena Diatómica

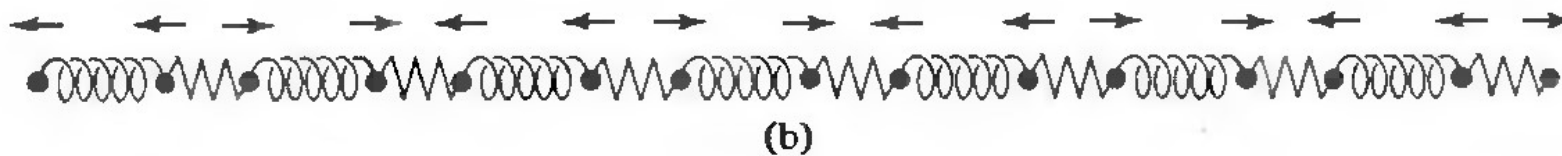
$$k = \pi/a$$

$$\omega = \sqrt{\frac{2K}{M}}, \quad \epsilon_1 = -\epsilon_2$$

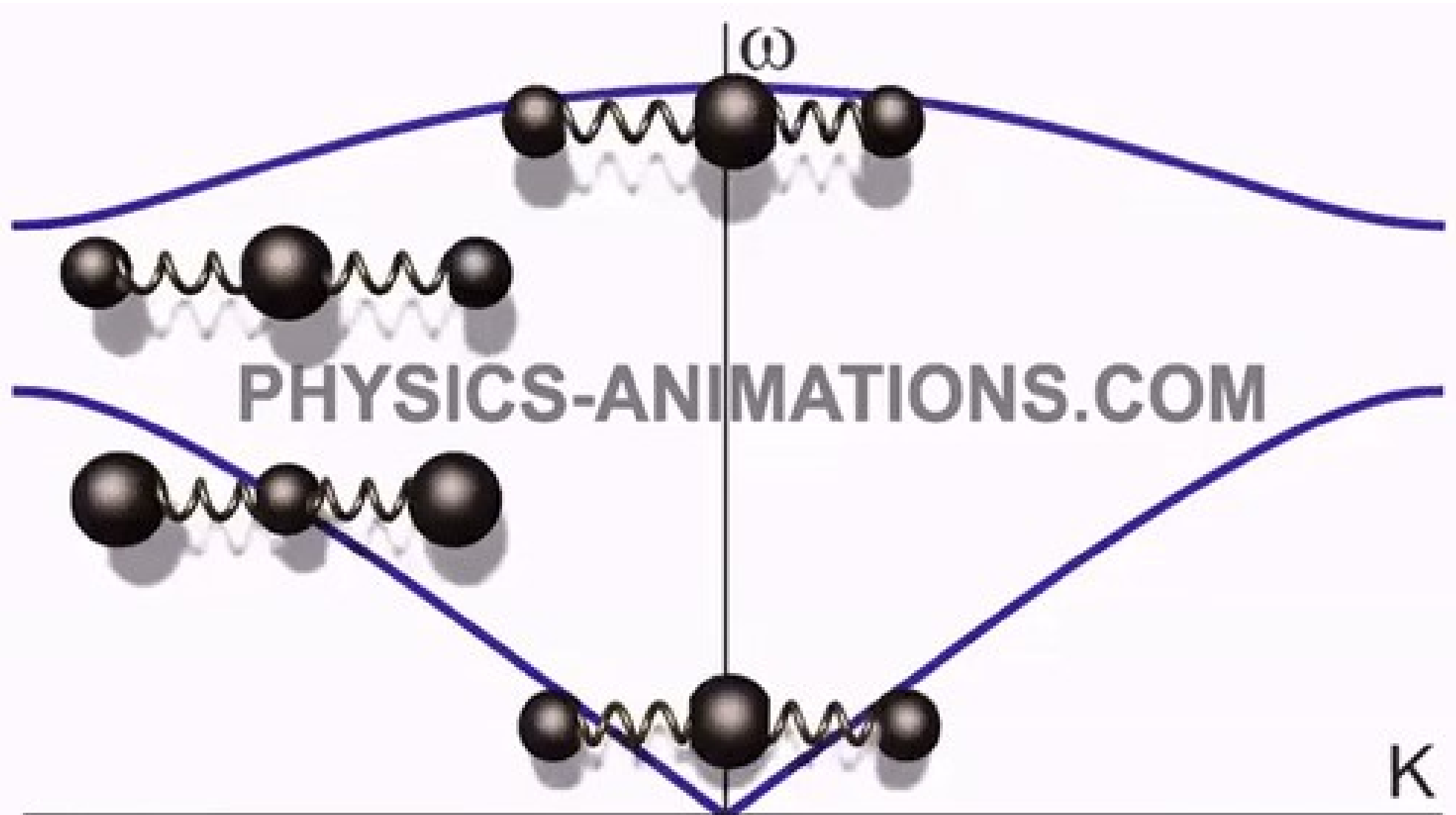
$$\omega = \sqrt{\frac{2G}{M}}, \quad \epsilon_1 = \epsilon_2$$



Modo
acústico



Modo
óptico

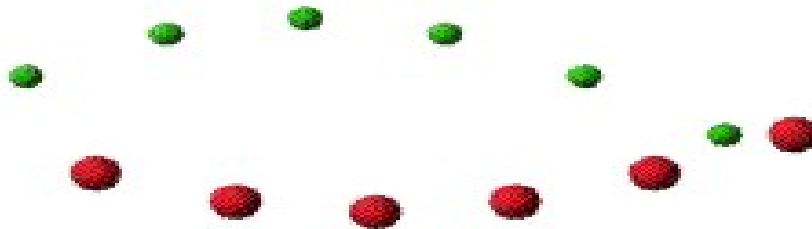


Cadena Diatómica

Para un modelo con desplazamientos transversales



Modo acústico



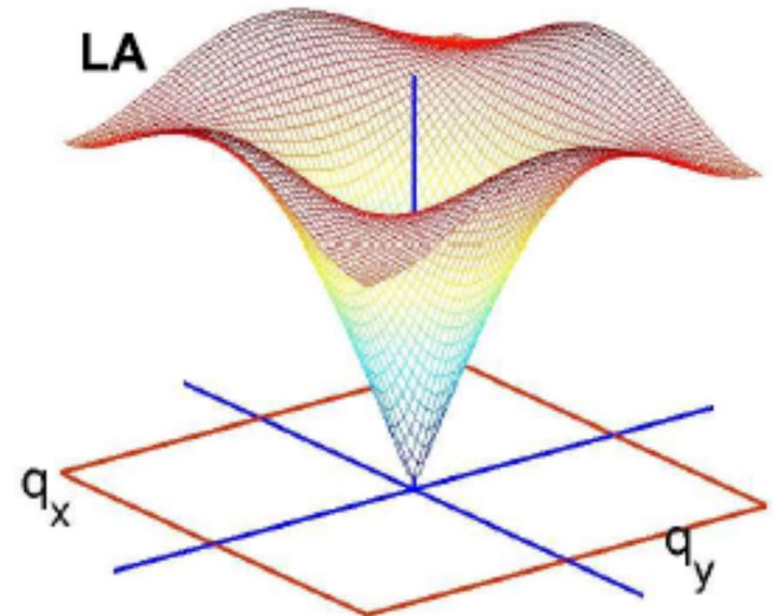
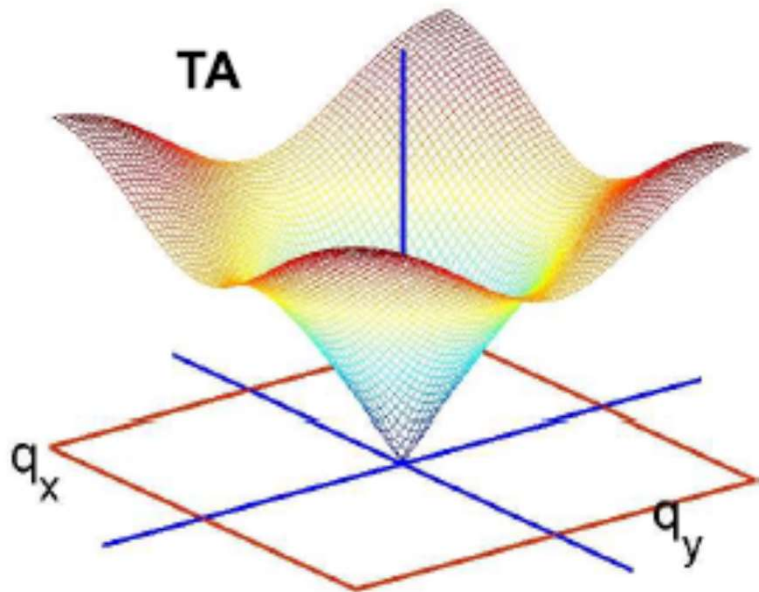
Modo óptico

Software “Simulation for Solid State Physics”

Cadena monoatómica con desplazamientos transversales

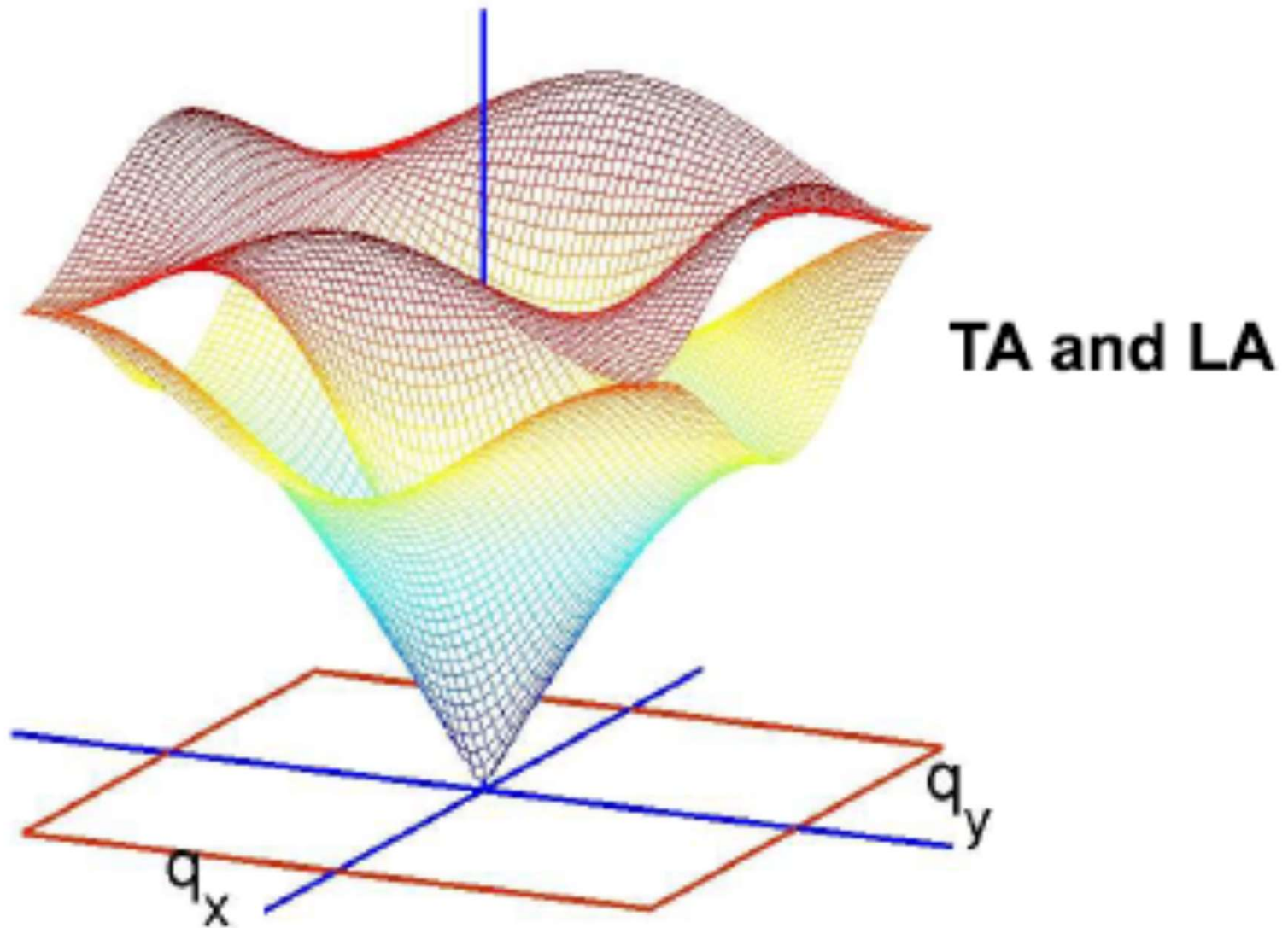
Comentarios: Fonones en 2D y 3D

Ej.: Red cuadrada 2D $\implies \omega_j(\vec{k})$ con $\vec{k} = (k_x, k_y)$



Comentarios: Fonones en 2D y 3D

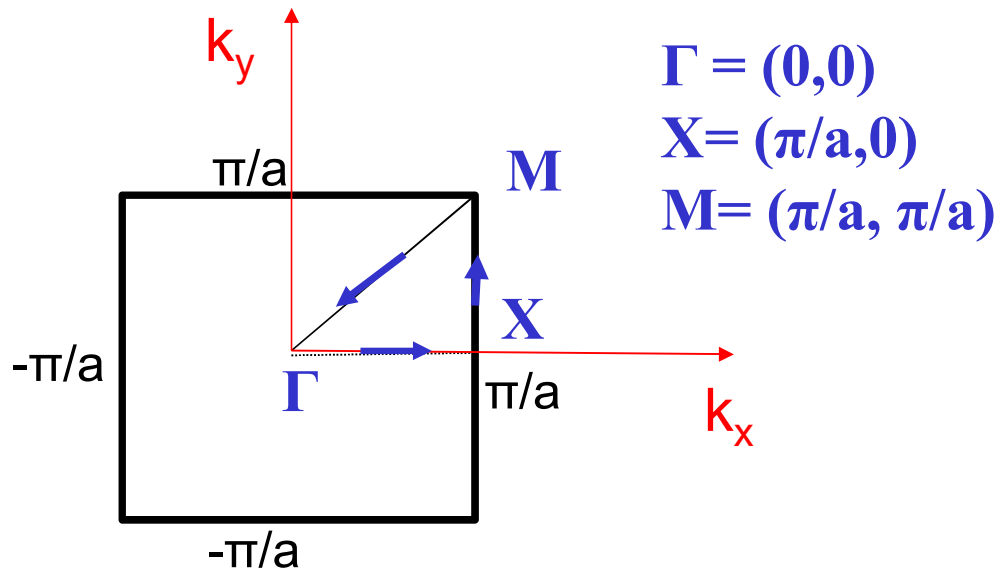
Ej.: Red cuadrada 2D $\implies \omega_j(\vec{k})$ con $\vec{k} = (k_x, k_y)$



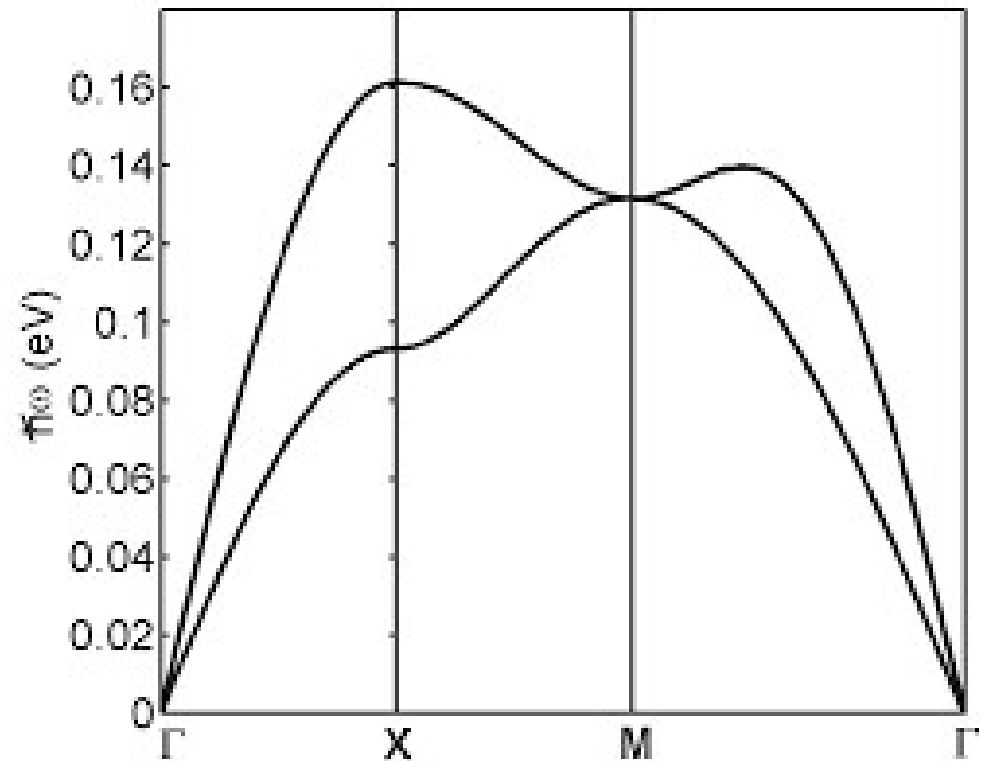
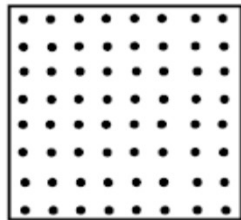
Comentarios: Fonones en 2D y 3D

- Las relaciones de dispersión $\omega_j(\vec{k})$ se grafican a lo largo de caminos que unen puntos de alta simetría.

Ej.: Red cuadrada 2D $\implies \omega_j(\vec{k})$ con $\vec{k} = (k_x, k_y)$

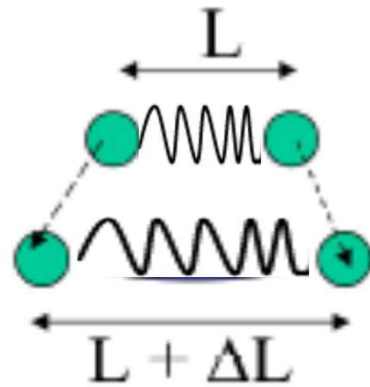


CPC:
NxN puntos



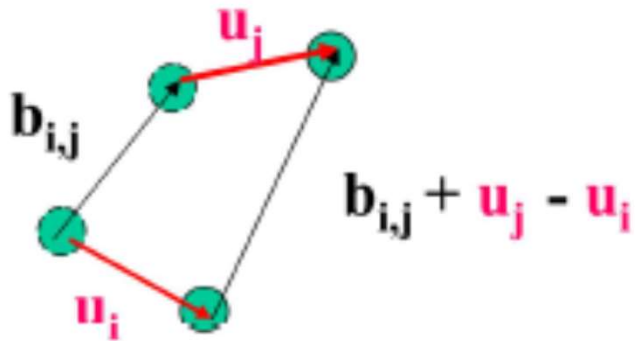
Comentarios: Fonones en 2D y 3D

Para resortes
longitudinales



Bond Stretching

$$E_s = \frac{1}{2} \kappa (\Delta L)^2$$

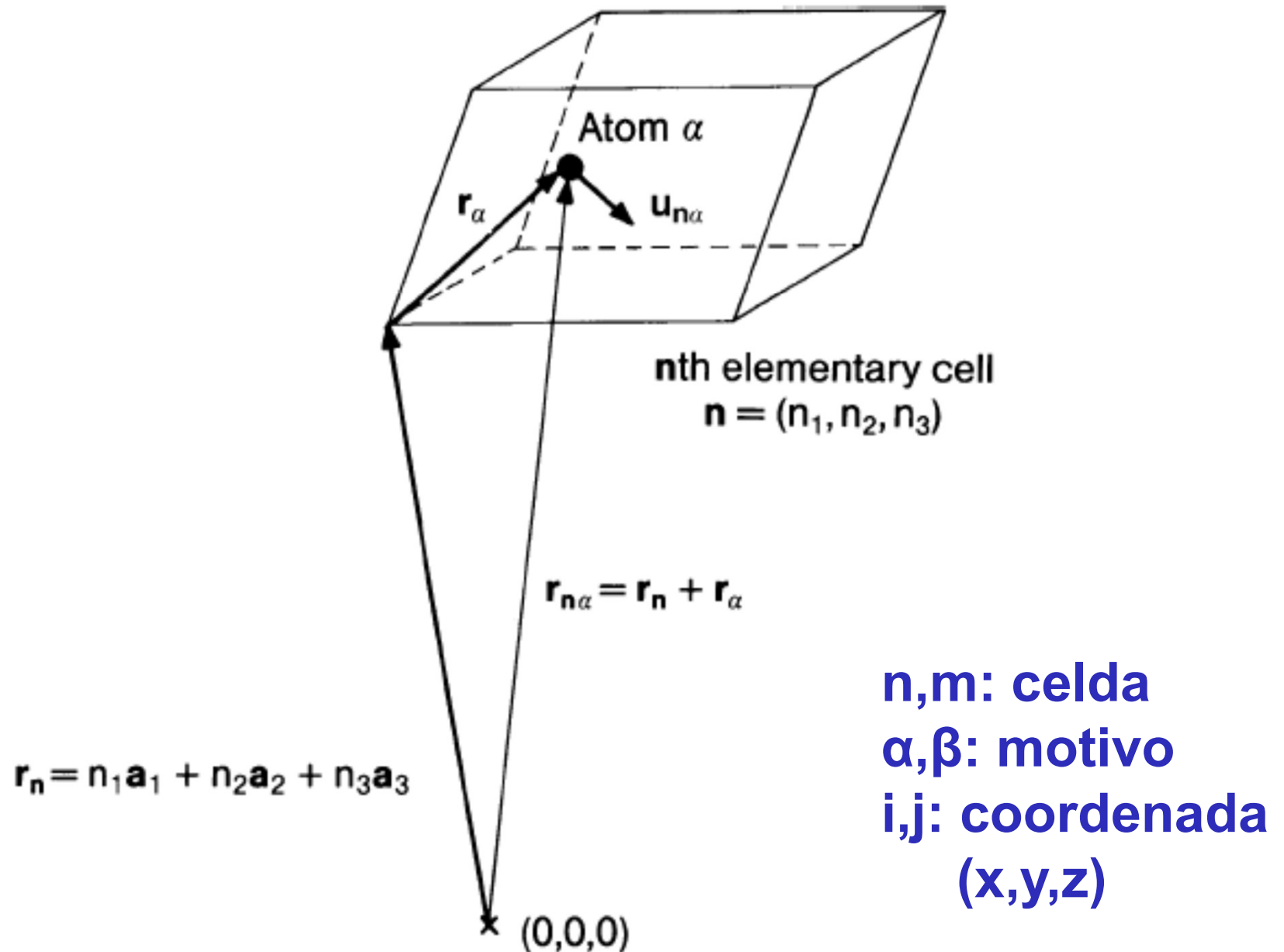


$$\Delta L = |\vec{\mathbf{b}} + \vec{\mathbf{u}}_j - \vec{\mathbf{u}}_i| - |\vec{\mathbf{b}}| \quad \longrightarrow \quad \Delta L \approx \hat{\mathbf{b}}_{i,j} \cdot (\vec{\mathbf{u}}_j - \vec{\mathbf{u}}_i)$$

$$E_s = \frac{1}{2} \kappa \left(\hat{\mathbf{b}}_{i,j} \cdot (\vec{\mathbf{u}}_j - \vec{\mathbf{u}}_i) \right)^2$$

Formulación general

Notación :



Formulación general

Expandimos la energía total del cristal en función de las coordenadas nucleares

$$\Phi(r_{n\alpha i} + u_{n\alpha i}) = \Phi(r_{n\alpha i}) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{n\alpha i \\ m\beta j}} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial r_{n\alpha i} \partial r_{m\beta j}} u_{n\alpha i} u_{m\beta j} \dots$$

Definimos las constantes de acoplamiento como: $\frac{\partial^2 \Phi}{\partial r_{n\alpha i} \partial r_{m\beta j}} = \Phi_{n\alpha i}^{m\beta j}$

Las ecuaciones de movimiento quedan:

$$M_{\alpha} \ddot{u}_{n\alpha i} + \sum_{m\beta j} \Phi_{n\alpha i}^{m\beta j} u_{m\beta j} = 0 .$$

Para N celdas con r átomos, tengo 3rN ecuaciones

Formulación general

Propongo como solución:

$$u_{n\alpha i} = \frac{1}{\sqrt{M_\alpha}} u_{\alpha i}(\mathbf{q}) e^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_n - \omega t)} .$$

$$-\omega^2 u_{\alpha i}(\mathbf{q}) + \underbrace{\sum_{\beta j} \sum_m \frac{1}{\sqrt{M_\alpha M_\beta}} \Phi_{n\alpha i}^{m\beta j} e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_m - \mathbf{r}_n)} u_{\beta j}(\mathbf{q})}_{D_{\alpha i}^{\beta j}(\mathbf{q})} = 0 .$$

Matriz Dinámica
(3r x 3r)

$$-\omega^2 u_{\alpha i}(\mathbf{q}) + \sum_{\beta j} D_{\alpha i}^{\beta j}(\mathbf{q}) u_{\beta j}(\mathbf{q}) = 0$$

Soluciones distinta de la trivial si:

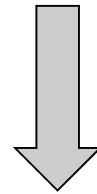
$$\text{Det} \{ D_{\alpha i}^{\beta j}(\mathbf{q}) - \omega^2 \mathbf{1} \} = 0$$

Esta ecuación tiene **3r soluciones** diferentes $\omega(\mathbf{q})$ para cada \mathbf{q}

Formulación general

Se puede demostrar que :

$D_{\alpha_i}^{\beta_j}(\mathbf{q})$ es una matriz simétrica



3r autovalores reales

3r autovectores ortonormales

(para cada \mathbf{q})

$$\omega_j(\mathbf{q}) \quad j=1,2,\dots,3r$$

Relaciones de dispersión

Formulación general

$$\omega_j(\mathbf{q})$$

Posibles valores de \mathbf{q} ?

Las condiciones periódicas: $\mathbf{u}(\mathbf{R} + N_i \mathbf{a}_i) = \mathbf{u}(\mathbf{R})$

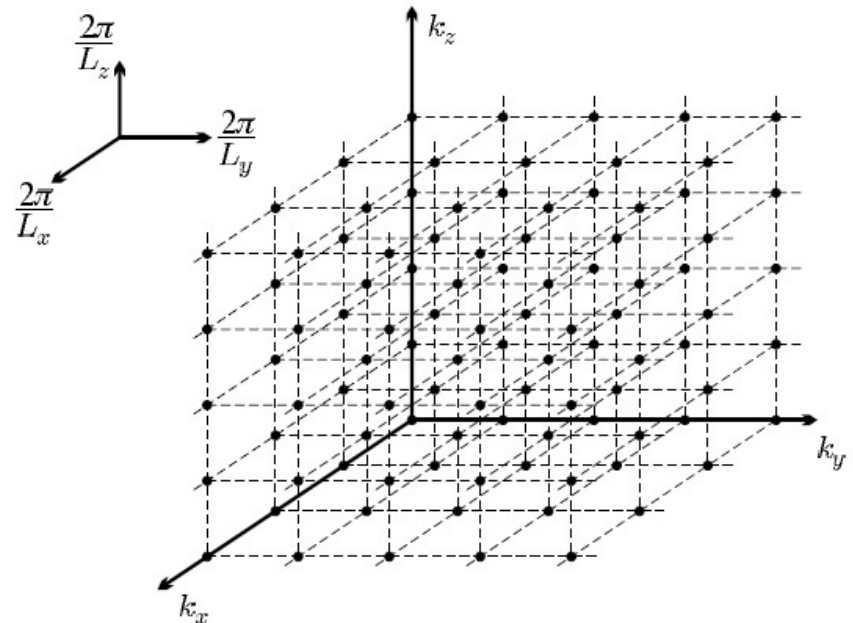
$N_1 a_1, N_2 a_2, N_3 a_3$ dimensiones del cristal

$N_1 N_2 N_3 = N$ número total de celdas

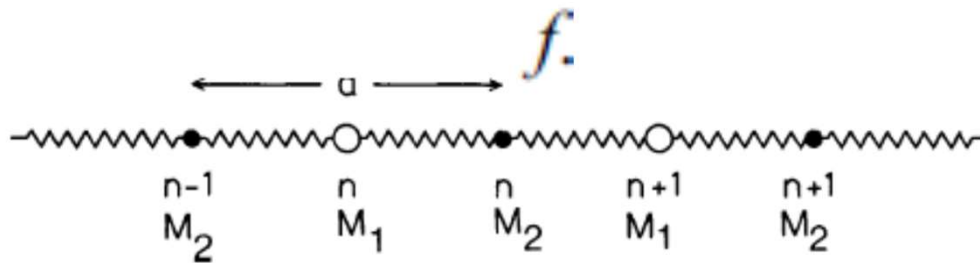
**3rN modos
normales**

$$\mathbf{q} = \frac{n_1}{N_1} \mathbf{b}_1 + \frac{n_2}{N_2} \mathbf{b}_2 + \frac{n_3}{N_3} \mathbf{b}_3,$$

El número total de puntos \mathbf{q} dentro de la 1^{era} zona de Brillouin es \mathbf{N} (n^o celdas)



Ejemplo: cadena diatómica



1 dimensión y $r = 2$

$D_{\alpha i}^{\beta j}(\mathbf{q})$ matriz 2x2

Las ecuaciones de movimiento quedan :

$$M_1 \ddot{u}_{n1} + \Phi_{n1}^{n-1,2} u_{n-1,2} + \Phi_{n1}^{n1} u_{n1} + \Phi_{n1}^{n2} u_{n2} = 0 ,$$

$$M_2 \ddot{u}_{n2} + \Phi_{n2}^{n1} u_{n1} + \Phi_{n2}^{n2} u_{n2} + \Phi_{n2}^{n+1,1} u_{n+1,1} = 0 .$$

Las constantes de acoplamiento :

$$\Phi_{n1}^{n-1,2} = \Phi_{n1}^{n2} = \Phi_{n2}^{n1} = \Phi_{n2}^{n+1,1} = -f$$

$$\Phi_{n1}^{n1} = \Phi_{n2}^{n2} = +2f .$$

$$M_1 \ddot{u}_{n1} + f(2u_{n1} - u_{n2} - u_{n-1,2}) = 0 ,$$

$$M_2 \ddot{u}_{n2} + f(2u_{n2} - u_{n1} - u_{n+1,1}) = 0 .$$

Ejemplo: cadena diatómica

Propongo :
$$u_{n\alpha} = \frac{1}{\sqrt{M_\alpha}} u_\alpha(q) e^{i(qan - \omega t)}$$

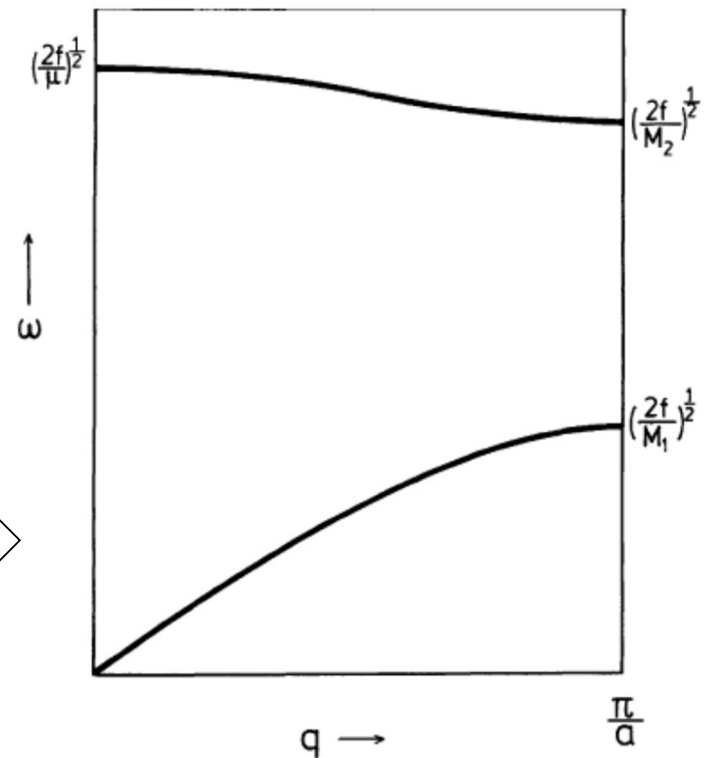
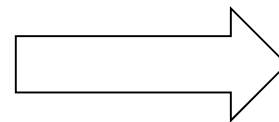
$$\left(\frac{2f}{M_1} - \omega^2\right)u_1 - f\frac{1}{\sqrt{M_1M_2}}(1 + e^{-iqa})u_2 = 0,$$

$$-f\frac{1}{\sqrt{M_1M_2}}(1 + e^{iqa})u_1 + \left(\frac{2f}{M_2} - \omega^2\right)u_2 = 0.$$

$$\omega^2 = f\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2}\right) \pm f\left[\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2}\right)^2 - \frac{4}{M_1M_2}\sin^2\frac{qa}{2}\right]^{1/2}$$

La matriz dinámica $D_{\alpha i}^{\beta j}(q)$ es :

$$\begin{pmatrix} \frac{2f}{M_1} & \frac{-f}{\sqrt{M_1M_2}}(1 + e^{-iqa}) \\ \frac{-f}{\sqrt{M_1M_2}}(1 + e^{iqa}) & \frac{2f}{M_2} \end{pmatrix}.$$



Unidades

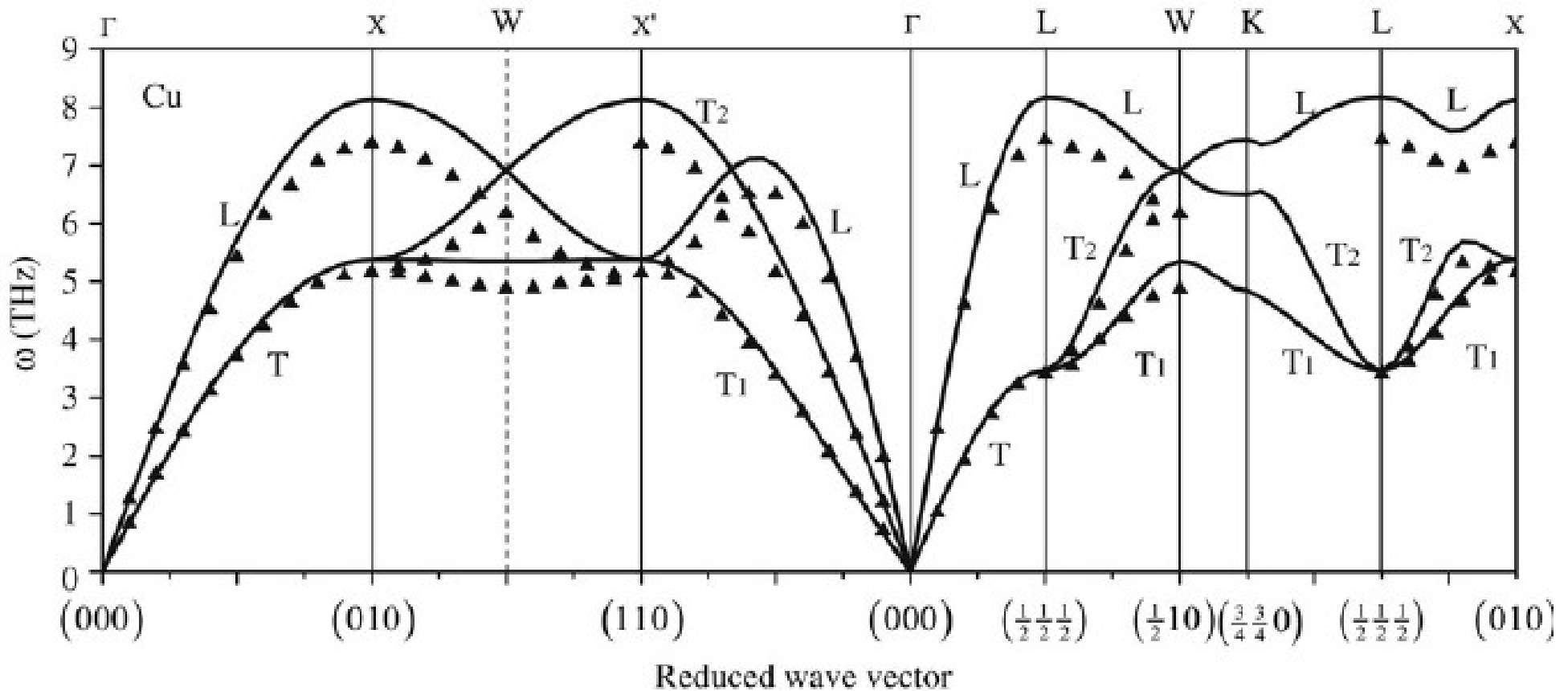
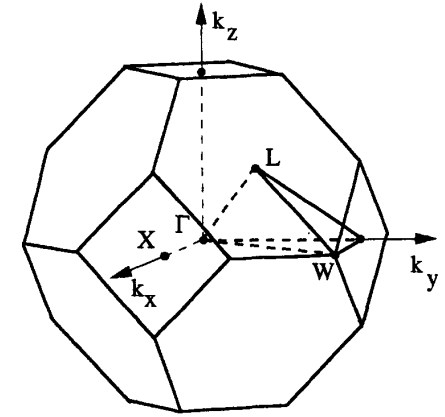
Table 1 Energy units of most frequent use for phonons.

$h\nu$ ($\nu = 10^{12}$ hertz) = 4.1357 meV	$\hbar\omega$ ($\omega = 10^{13}$ rad/sec) = 6.5822 meV
$1 \text{ eV}/hc = 8065 \text{ cm}^{-1}$	$1 \text{ eV}/k_B = 11605 \text{ K}$
<i>for brevity:</i> $1 \text{ eV} \longleftrightarrow 8065 \text{ cm}^{-1}$	$1 \text{ eV} \longleftrightarrow 11605 \text{ K}$
$1 \text{ meV} \longleftrightarrow 8.065 \text{ cm}^{-1}$	$1 \text{ cm}^{-1} \longleftrightarrow 0.124 \text{ meV}$

Cristal monoatómico tridimensional: Ejemplo Cu

$r = 1 \implies D_{\alpha i}^{\beta j}(\mathbf{q})$ matriz 3x3

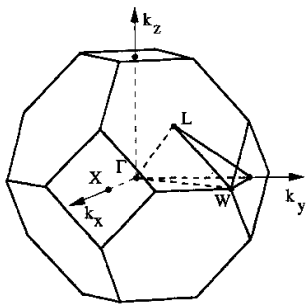
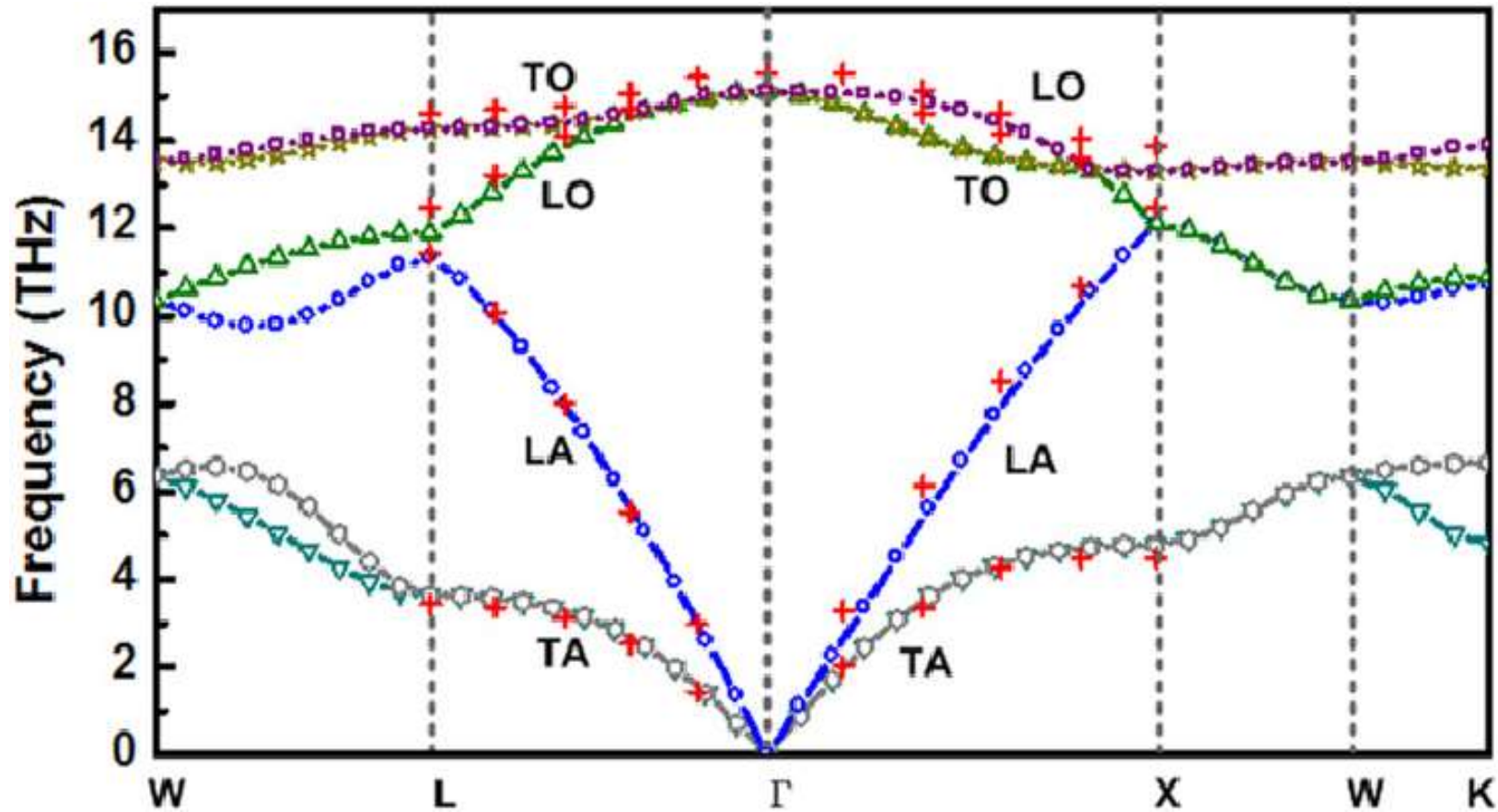
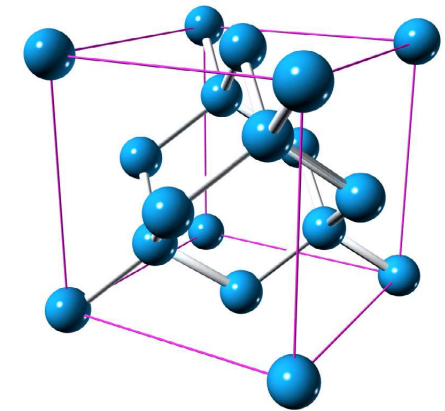
Tres soluciones $\omega(\mathbf{q})$ para cada \mathbf{q} de la 1ZB



Cristal diatómico tridimensional: Ejemplo Si

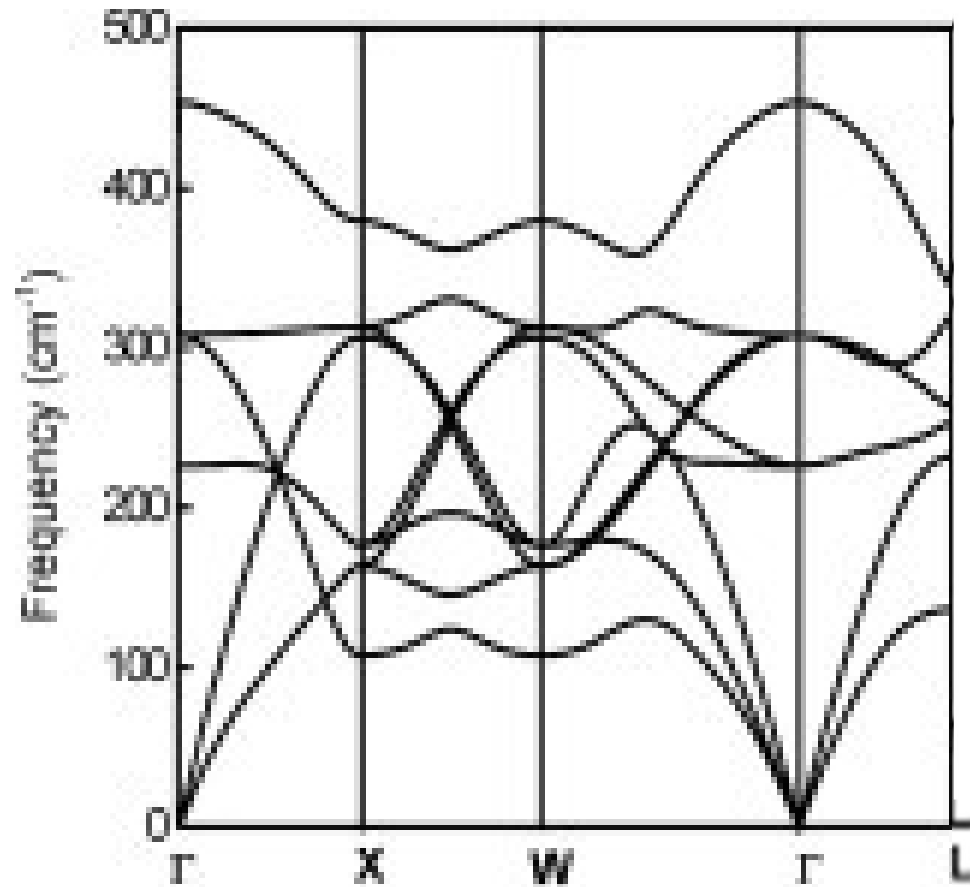
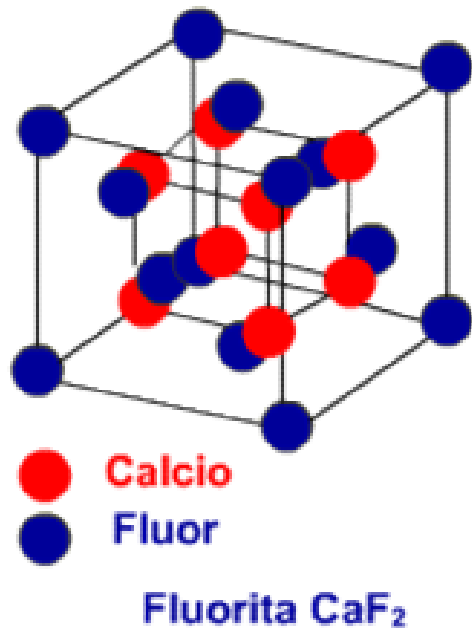
$r = 2 \implies D_{\alpha i}^{\beta j}(\mathbf{q})$ matriz 6x6

Seis soluciones $\omega(\mathbf{q})$ para cada \mathbf{q} de la 1ZB



Cristal poliatómico tridimensional

Para un cristal con p átomos en el motivo habrá $3Np$ grados de libertad, lo que lleva a 3 ramas acústicas y $3(p-1)$ ramas ópticas



Transformación a coordenadas normales

Veamos la dinámica de la red en términos de una transformación de coordenadas que convierta el problema en osciladores desacoplados.

Para la cadena monoatómica:

$$u_n \rightarrow A_k / u_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k A_k e^{ikna} \quad \text{con } A_{-k} = A_k \text{ condición de realidad}$$

Teniendo en cuenta que:

$$\frac{1}{N} \sum_n e^{i(k-k')na} = \delta_{kk'} \quad \frac{1}{N} \sum_k e^{i(n-n')ka} = \delta_{nn'}$$

$$-\frac{\pi}{a} < K \leq \frac{\pi}{a}. \quad k = \frac{2\pi j}{a N}, \quad -N/2 < j < N/2$$

Transformación a coordenadas normales

Tenemos la transformación inversa:

$$A_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n u_n e^{-ikna}$$

$$U = \frac{K}{2} \sum_n (u_n - u_{n+1})^2 = \dots = \frac{1}{2} \sum_k M\omega^2(k) A_k A_{-k}$$

$$L = T - U$$

$$T = \frac{M}{2} \sum_k \dot{A}_k \dot{A}_{-k}$$

$$P_k = \frac{\partial L}{\partial \dot{A}_k} = M \dot{A}_{-k}$$

$$H = \frac{1}{2} \sum_k \left\{ \frac{P_k P_{-k}}{M} + M\omega^2(k) A_k A_{-k} \right\}$$

**N osciladores
independientes**

Transformación a coordenadas normales

Corresponde a un sistema de osciladores desacoplados con coordenadas A_k y momentos $P_k \longrightarrow$ coordenadas normales.

Las ecuaciones de movimientos son :

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{A}_k} \right) - \frac{\partial L}{\partial A_k} = 0 \longrightarrow \ddot{A}_{-k} = -\omega^2(k) A_k$$

Análoga a la de un oscilador armónico $\ddot{x} = -\omega^2 x$

Transformación a coordenadas normales

Para el caso general de un cristal tridimensional con p átomos con celda, las coordenadas normales adquieren un índice de rama (o polarización)

$$A_k^\lambda \leftarrow \lambda = 1 \overbrace{[2,3]} \dots \overbrace{[3p]}$$

acústicas *ópticas*

Primera Zona

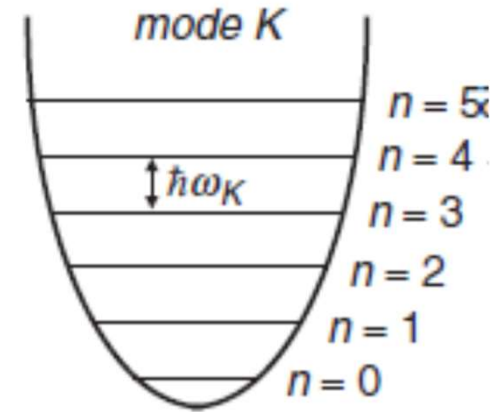
$$H = \frac{1}{2} \sum_{k,\lambda} \left\{ \frac{1}{M} P_k^\lambda P_{-k}^\lambda + M \omega_\lambda^2(k) A_k^\lambda A_{-k}^\lambda \right\}$$

3pN osciladores independientes

Cuantificación \rightarrow Fonones

Repaso...para un oscilador armónico:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2. \quad \epsilon_n = \omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$



Paso a operadores de creación y destrucción $(\hat{x}, \hat{p}) \rightarrow (\hat{a}, \hat{a}^\dagger)$

$$\hat{a} \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2}} \left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right), \quad \hat{a}^\dagger \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2}} \left(\hat{x} - \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right).$$

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1.$$

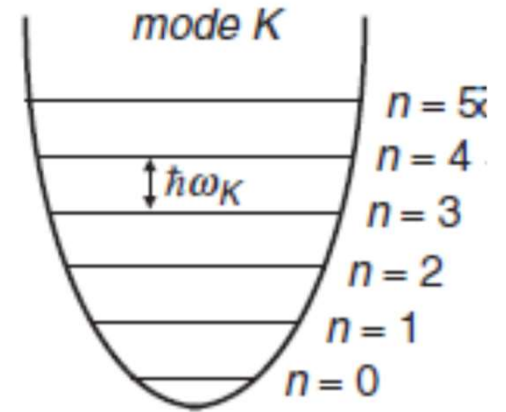
$$\hat{a}|0\rangle = 0. \quad |n\rangle \equiv \frac{1}{(n!)^{1/2}} \hat{a}^{\dagger n} |0\rangle. \quad \hat{H} = \omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right)$$

Cuantificación \rightarrow Fonones

Repaso...para un oscilador armónico:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2.$$

$$\varepsilon_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$



Paso a operadores de creación y destrucción $(\hat{x}, \hat{p}) \rightarrow (\hat{a}, \hat{a}^\dagger)$

$$\hat{a} \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2}} \left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right), \quad \hat{a}^\dagger \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2}} \left(\hat{x} - \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right).$$

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1. \quad \hat{a}|0\rangle = 0. \quad |n\rangle \equiv \frac{1}{(n!)^{1/2}} \hat{a}^{\dagger n} |0\rangle.$$

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \hbar\omega (a^\dagger a + a a^\dagger) = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \quad \hat{n} = a^\dagger a$$

Cuantificación \longrightarrow Fonones

Esto implica un cambio de interpretación

$|0\rangle$ estado de vacío, sin partículas.

$$\mathcal{H} = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right)$$

$\hat{a}^\dagger |0\rangle$ estado con una partícula

$$\hat{a}^\dagger \hat{a} |n\rangle = n |n\rangle$$

$\hat{a}^{\dagger n} |0\rangle$ estado con n partículas

La energía del sistema en un estado con n partículas es $n \hbar\omega$.

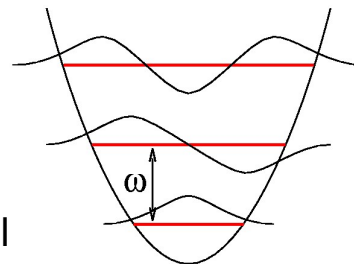
Pictóricamente:

Representación original

2do excitado

1er excitado

Estado fundamental



Nueva representación

●●○ 2'fonones'

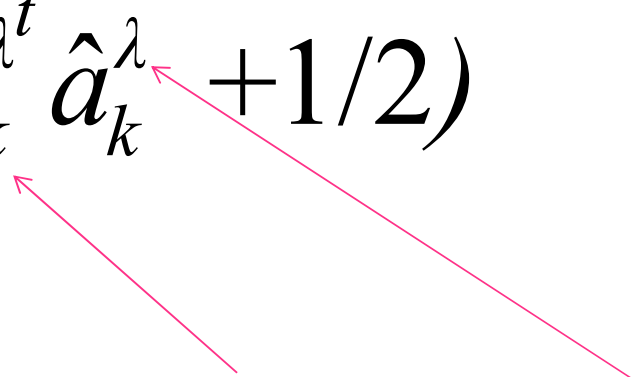
●○○ 1'fonon'

○○○ Sin 'fonones'



Cuantificación para el cristal armónico

El Hamiltoniano queda:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{k,\lambda} \omega^\lambda(k) (\hat{a}_k^{\lambda\dagger} \hat{a}_k^\lambda + 1/2)$$


Ahora los fonones tienen estructura (momento y polarización)

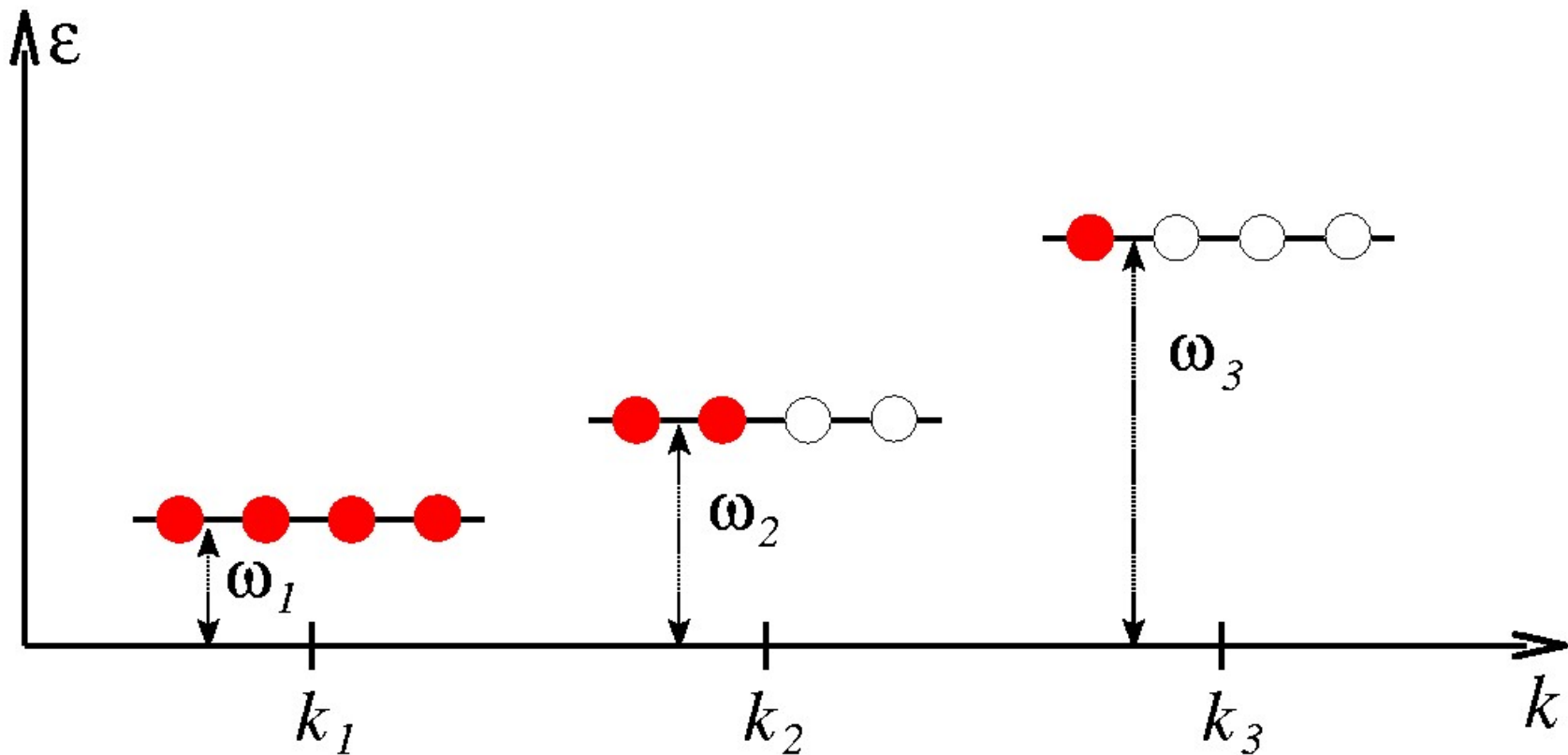
Un estado se determina por el n° de fonones para cada \mathbf{k} y λ

$$|\{n_k^\lambda\}\rangle =$$

$$|n_{k_1}^{\lambda_1}, n_{k_1}^{\lambda_2}, \dots, n_{k_1}^{3p}, n_{k_2}^{\lambda_1}, n_{k_2}^{\lambda_2}, \dots, n_{k_2}^{3p}, \dots, n_{k_N}^{\lambda_1}, n_{k_N}^{\lambda_2}, \dots, n_{k_N}^{3p}\rangle$$

Cuantificación para el cristal armónico

La nueva interpretación para una cadena sería



$$E_{\text{Total}} = \sum_K E_{n_K}^{(K)} = \sum_K \left(n_K + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_K.$$

Termodinámica del cristal armónico

La mecánica estadística clásica predice que el calor específico para un sólido monoatómico debería ser constante e igual a

$$C_V = 3 R$$

Ley de Dulong y
Petit de (1819)

Para un cristal poliatómico (r: número de átomos del motivo)

$$C_V = 3 r R$$

Cristal: conjunto de osciladores armónicos (Prin. de equipartición):

Cada modo : $\frac{1}{2} KT (E_c) + \frac{1}{2} KT (V)$ $3Nr$ modos $\implies U = 3NrKT$

Para 1 mol $N=N_A$ $U=3rN_AKT=3rRT$ $\implies C_V = (\partial U / \partial T)_V = 3rR$

Termodinámica del cristal armónico

$$C_v = 3 R = 5.958 \text{ cal/mol}^\circ\text{K} = 24.943 \text{ J/mol}^\circ\text{K}$$

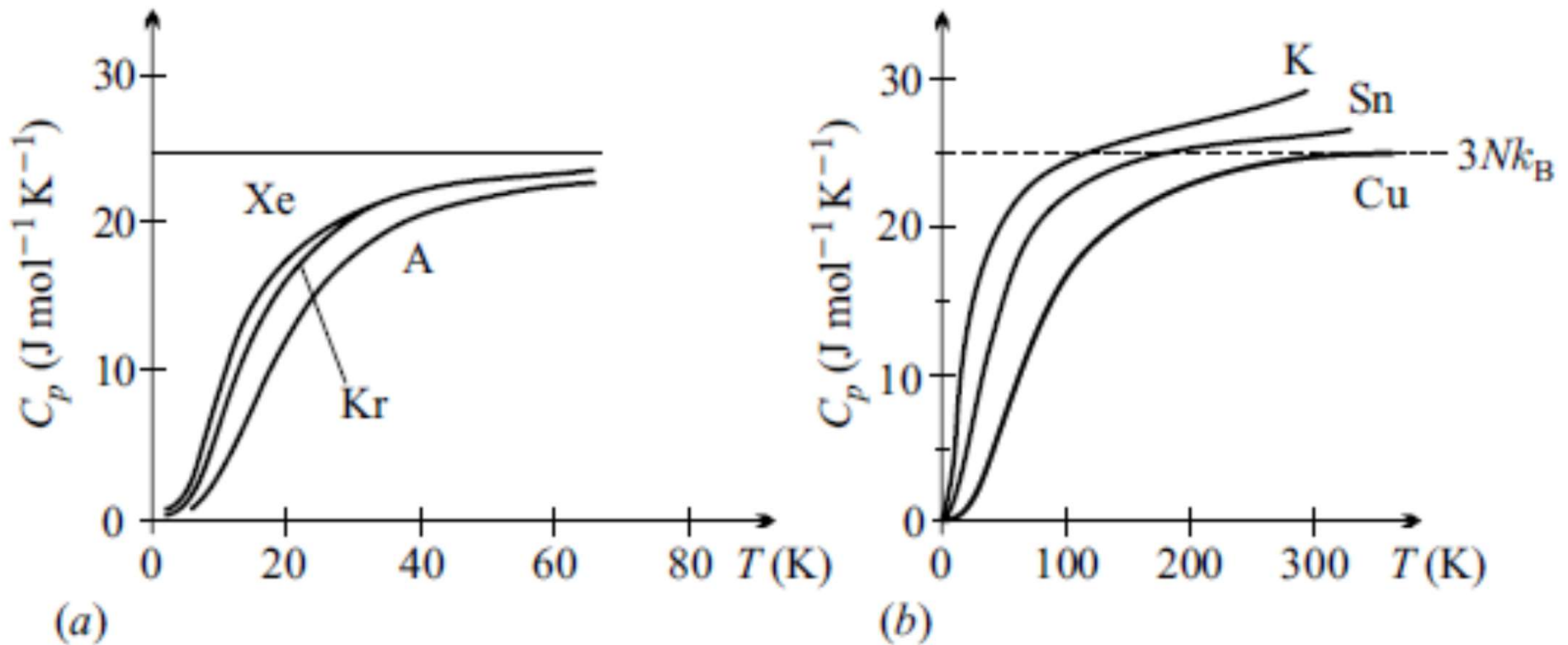
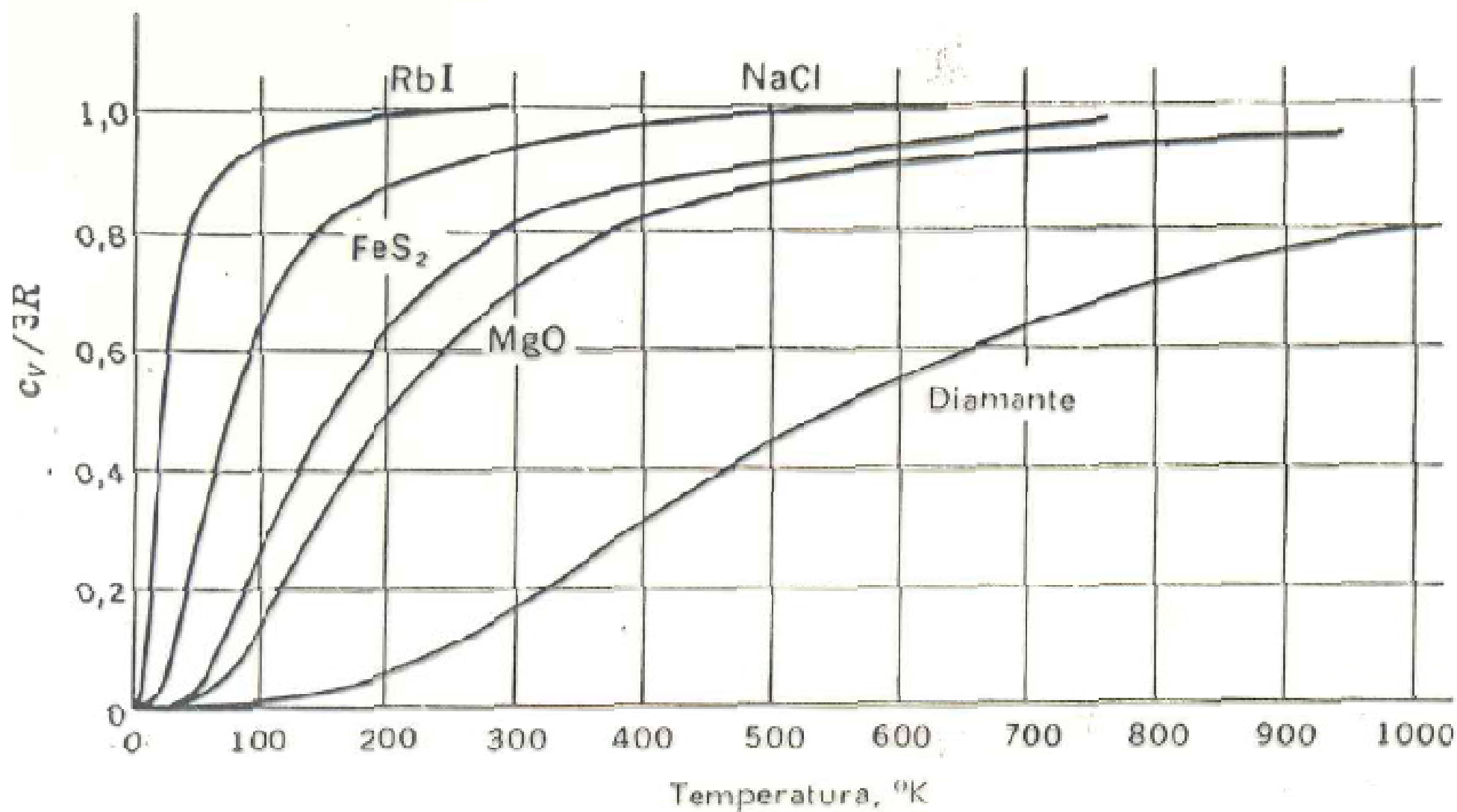


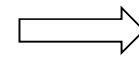
Fig. 11.15. Temperature dependence of the specific heat for (a) noble-gas crystals; (b) some metals

Termodinámica del cristal armónico



Termodinámica del cristal armónico

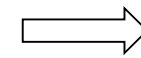
Einstein (1907) : N osciladores cuánticos



$$\omega = \omega_E$$



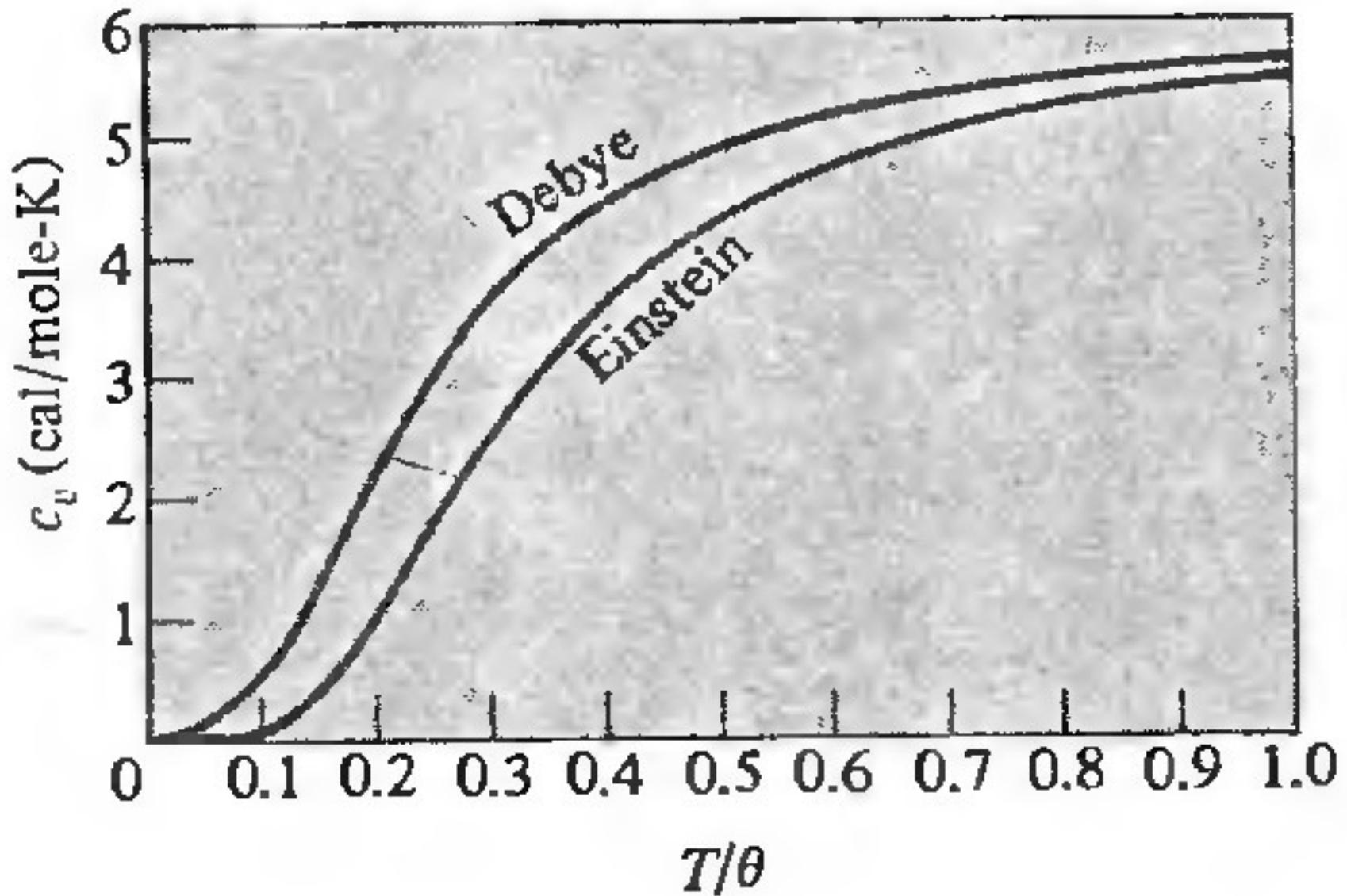
Debye (1912) : medio isotrópico continuo



$$\omega(q) = c q$$



Termodinámica del cristal armónico



Después estudiaremos estos dos modelos en detalle

Termodinámica del cristal armónico

La contribución de las vibraciones a la energía interna es:

$$E = \langle \mathcal{H} \rangle = \sum_{\mathbf{q}, \lambda} \hbar \omega_{\lambda}(\mathbf{q}) \left[\langle a_{\lambda}^{\dagger}(\mathbf{q}) a_{\lambda}(\mathbf{q}) \rangle + \frac{1}{2} \right].$$

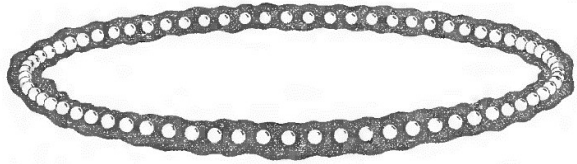
$$\langle n_{\lambda}(\mathbf{q}) \rangle \equiv \langle a_{\lambda}^{\dagger}(\mathbf{q}) a_{\lambda}(\mathbf{q}) \rangle = \frac{1}{e^{\hbar \omega_{\lambda}(\mathbf{q}) / k_{\text{B}} T} - 1}. \quad \text{Distribución Bose-Einstein}$$

$$E = \sum_{\mathbf{q}, \lambda} \hbar \omega_{\lambda}(\mathbf{q}) \left[\frac{1}{e^{\hbar \omega_{\lambda}(\mathbf{q}) / k_{\text{B}} T} - 1} + \frac{1}{2} \right]. \quad \longrightarrow \quad C_V = \frac{\partial E}{\partial T}$$

$$\sum_{\mathbf{q}} \rightarrow \int d\mathbf{q} \quad ?$$

Densidad de estados de fonones

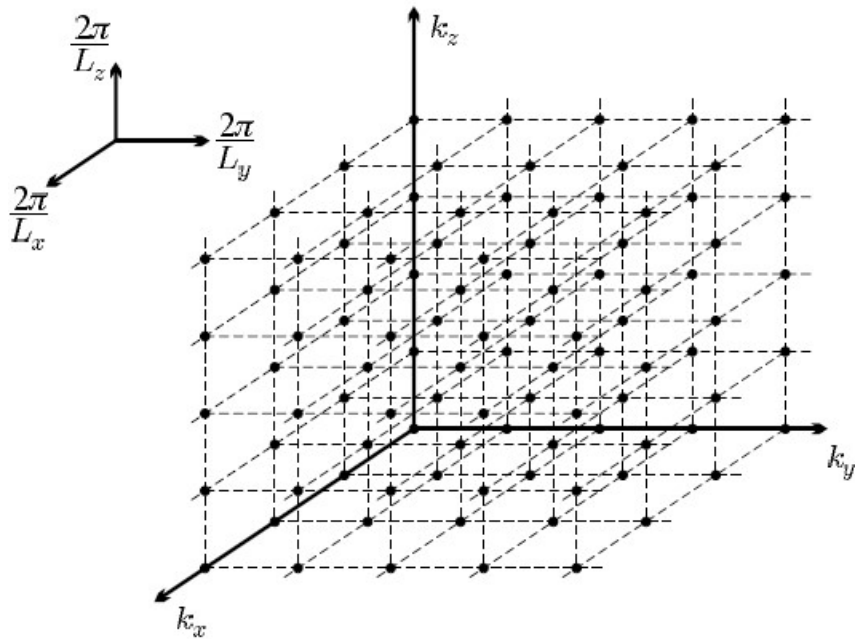
1D



$$e^{ikNa} = 1 \Rightarrow k = \frac{2\pi n}{a N}, \quad n \text{ entero}$$

$$K = 0, \quad \pm \frac{2\pi}{L}, \quad \pm \frac{4\pi}{L}, \quad \pm \frac{6\pi}{L}, \quad \dots, \quad \frac{N\pi}{L}, \quad \text{donde } L=Na$$

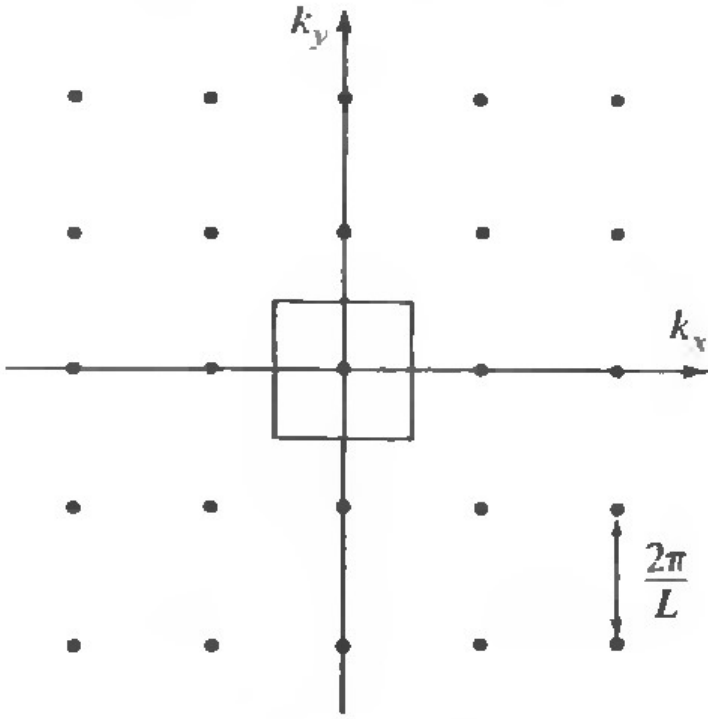
3D



$$\mathbf{k} = \frac{n_1}{N_1} \mathbf{b}_1 + \frac{n_2}{N_2} \mathbf{b}_2 + \frac{n_3}{N_3} \mathbf{b}_3,$$

$$K_x, K_y, K_z = 0; \quad \pm \frac{2\pi}{L}; \quad \pm \frac{4\pi}{L}; \quad \dots; \quad \frac{N\pi}{L}.$$

Densidad de estados de fonones



$$(2\pi/L)^3$$

Volumen del espacio k asociado aun estado

$$\begin{aligned} \Delta q &= \frac{b_1}{N_1} \cdot \left(\frac{b_2}{N_2} \times \frac{b_3}{N_3} \right) = \frac{1}{N} [b_1 b_2 b_3] \\ &= \frac{v_r}{N} = \frac{1}{N} \frac{(2\pi)^3}{v} = \frac{(2\pi)^3}{V} \end{aligned}$$

El número de estados que contiene una región de volumen Ω es:

$$\frac{\Omega}{(2\pi/L)^3} = \frac{\Omega V}{8\pi^3} \quad \Longrightarrow$$

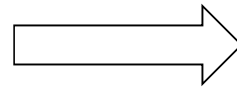
$$\frac{V}{8\pi^3}$$

Densidad de estados en el espacio k

Densidad de estados de fonones

$$\sum_{\mathbf{q}, \lambda} f(\omega_{\lambda}(\mathbf{q})) = \frac{1}{\frac{(2\pi)^3}{V}} \sum_{\mathbf{q}, \lambda} f(\omega_{\lambda}(\mathbf{q})) \frac{(2\pi)^3}{V} \Delta \mathbf{q}$$

En el límite cuando V es infinitamente grande



$$\sum_{\mathbf{q}} \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{q}.$$

$$\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}, \lambda} f(\omega_{\lambda}(\mathbf{q})) = \sum_{\lambda} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} f(\omega_{\lambda}(\mathbf{q}))$$

Las magnitudes evaluada son por unidad de volumen

In the general d -dimensional case $(2\pi)^3$ is replaced by $(2\pi)^d$

Densidad de estados de fonones

Por ejemplo:

$$c_v = \frac{\partial}{\partial T} \sum_s \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{\hbar\omega_s(\mathbf{k})}{e^{\hbar\omega_s(\mathbf{k})/k_B T} - 1},$$

Si la función depende de \mathbf{q} a través de $\omega_\lambda(\mathbf{q})$

$$\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}, \lambda} f(\omega_\lambda(\mathbf{q})) = \sum_\lambda \int d\omega g_\lambda(\omega) f(\omega) = \int d\omega g(\omega) f(\omega)$$

$$g_\lambda(\omega) = \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \delta(\omega - \omega_\lambda(\mathbf{q})),$$

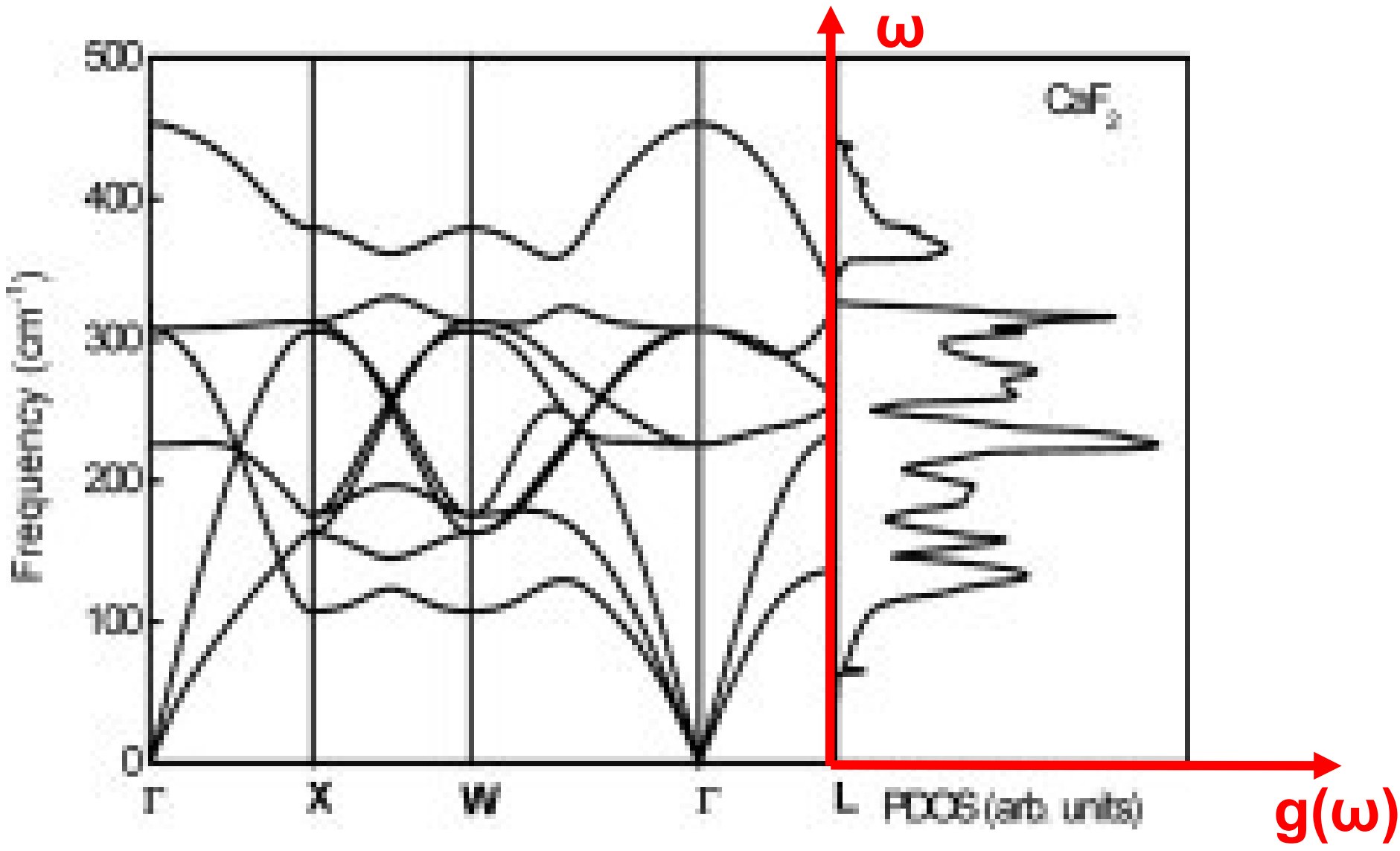
**Densidad de estados
parcial para la rama λ**

$$g(\omega) = \sum_\lambda \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \delta(\omega - \omega_\lambda(\mathbf{q})).$$

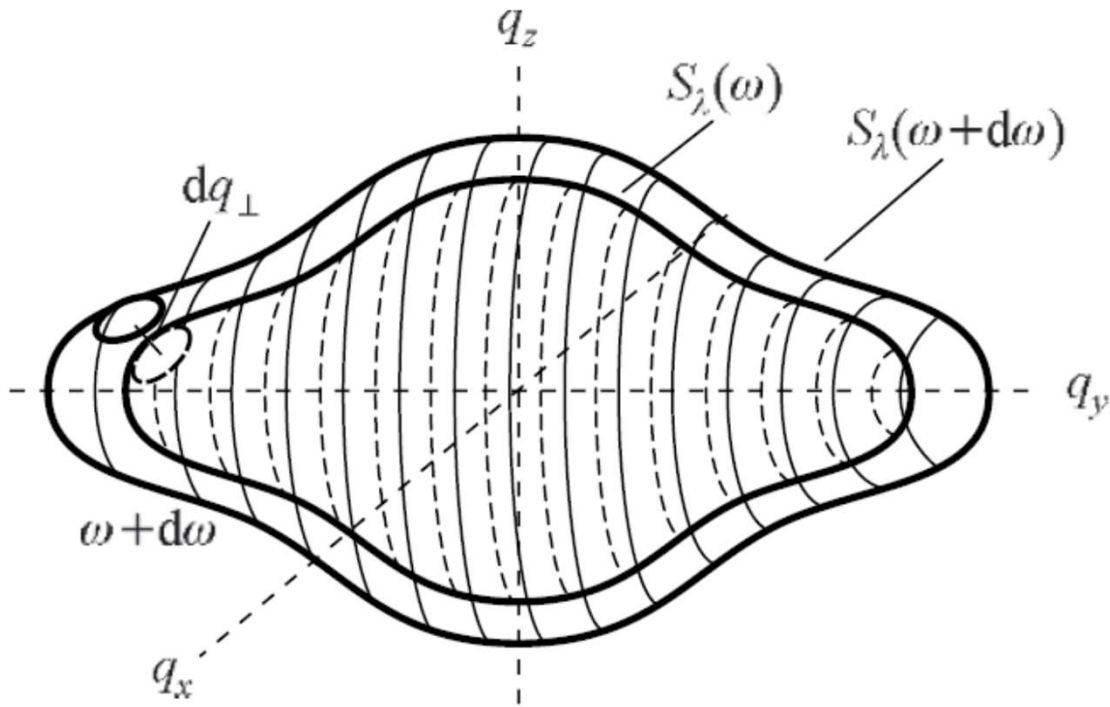
Densidad de estados

Densidad de estados de fonones

$d\omega g(\omega)$ \rightarrow N° estados por (unidad de V) entre ω y $\omega + d\omega$



Densidad de estados de fonones



El nº de estados entro del volumen es:

$$g_\lambda(\omega) d\omega = \int_{S_\lambda(\omega)} \frac{dS}{(2\pi)^3} dq_\perp(\mathbf{q})$$

Usando

$$\omega + d\omega = \omega + |\nabla_{\mathbf{q}}\omega_\lambda(\mathbf{q})| dq_\perp(\mathbf{q}) \longrightarrow dq_\perp(\mathbf{q}) = \frac{d\omega}{|\nabla_{\mathbf{q}}\omega_\lambda(\mathbf{q})|}$$

$$g_\lambda(\omega) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{S_\lambda(\omega)} \frac{dS}{|\nabla_{\mathbf{q}}\omega_\lambda(\mathbf{q})|} .$$

Densidad de estados de fonones

En nuestro curso determinaremos $g(\omega)$ en casos simples

$$d\omega g(\omega) = \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^3} \implies g(\omega) = \dots\dots$$

Ejemplo: $\omega_\lambda(\mathbf{q}) = c_\lambda |\mathbf{q}|$

$$d\vec{q} = S_\lambda(\omega) dq_\perp = 4\pi q^2 dq$$

$$g_\lambda(\omega) = \frac{4\pi q^2}{(2\pi)^3 (d\omega/dq)} \implies$$

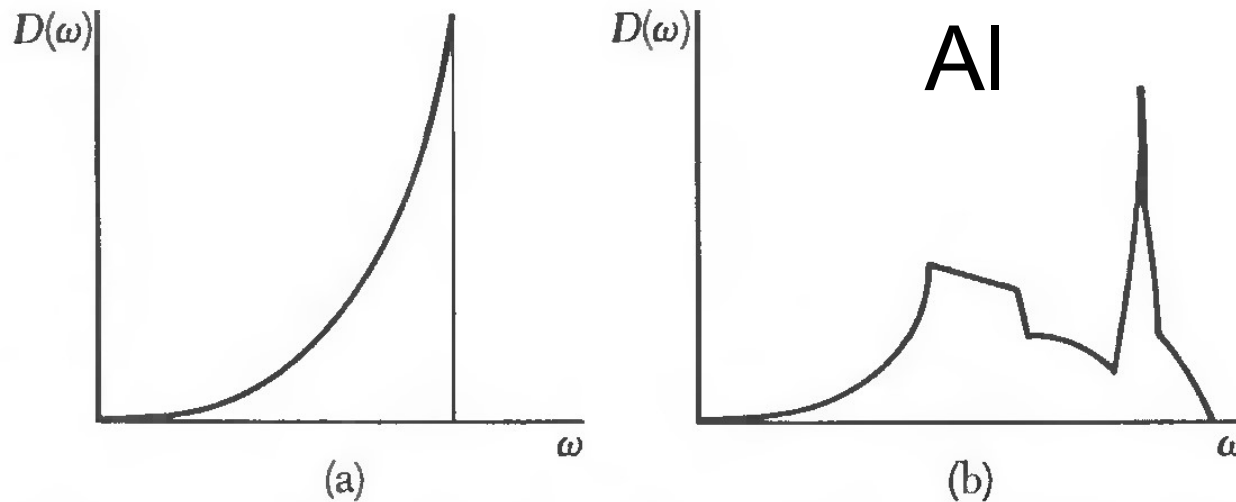
$\nearrow \left(\frac{\omega}{c_\lambda}\right)^2$
 $\searrow c_\lambda$

$$g_\lambda(\omega) = \frac{1}{2\pi^2} \frac{\omega^2}{c_\lambda^3}$$

Densidad de estados de fonones

$$g_D(\omega) = \begin{cases} 9p \frac{N}{V} \frac{\omega^2}{\omega_D^3}, & \text{if } \omega \leq \omega_D, \\ 0, & \text{if } \omega > \omega_D. \end{cases}$$

Modelo de Debye



$$g_E(\omega) = \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \delta(\omega - \omega_E) = \frac{N}{V} \delta(\omega - \omega_E)$$

Modelo de Einstein

Termodinámica del cristal armónico

$$E = \sum_{\mathbf{q}, \lambda} \hbar \omega_{\lambda}(\mathbf{q}) \left[\frac{1}{e^{\hbar \omega_{\lambda}(\mathbf{q})/k_B T} - 1} + \frac{1}{2} \right]. \quad \Longrightarrow \quad C_V = \frac{\partial E}{\partial T}$$

- Alta temperatura $\frac{\hbar \omega}{k_B T} \ll 1$

$$\frac{1}{e^x - 1} = \frac{1}{x + \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{6}x^3 + \dots} = \frac{1}{x} \left[1 - \frac{x}{2} + \frac{x^2}{12} + O(x^3) \right], \quad \Longrightarrow \quad C_V = 3rNK$$

$$x = \frac{\hbar \omega}{k_B T} \ll 1.$$

- Baja temperatura

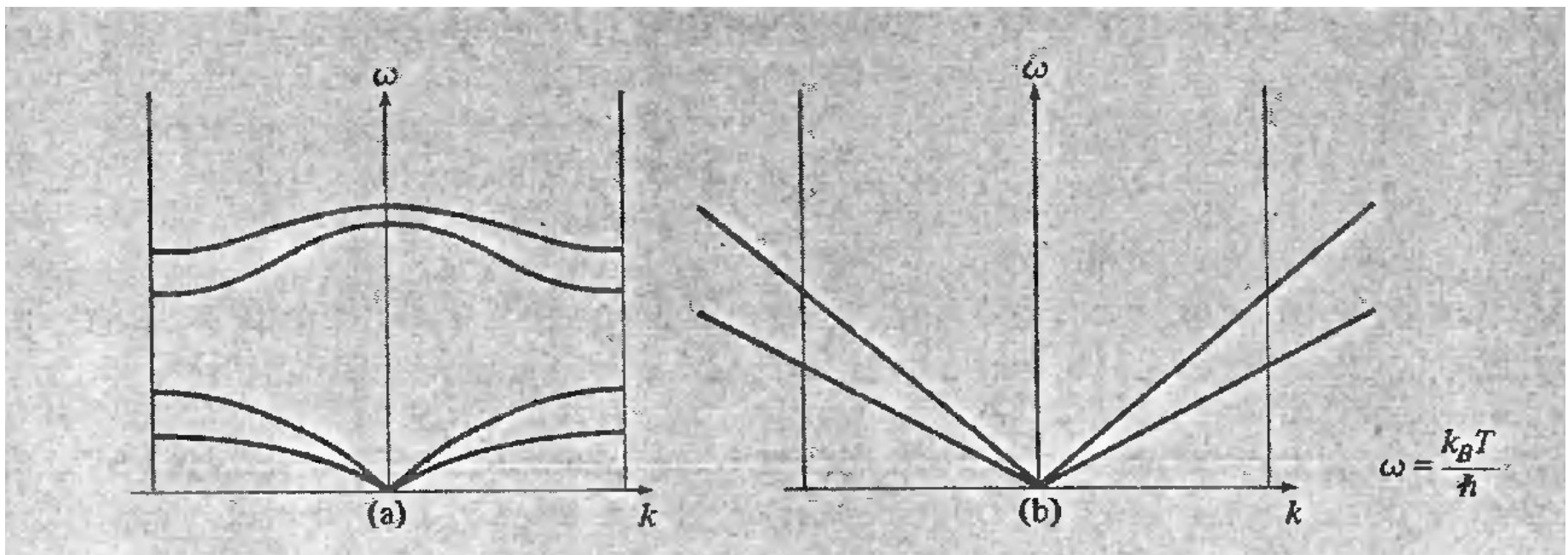
$$c_v = \frac{\partial}{\partial T} \sum_s \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{\hbar \omega_s(\mathbf{k})}{e^{\hbar \omega_s(\mathbf{k})/k_B T} - 1}$$

Cambié λ por s y pase de suma en \mathbf{k} a integral en la primera zona

A baja T los modos con $\hbar \omega_s(\mathbf{k}) \gg k_B T$ dan contribución despreciable porque el integrando se anula exponencialmente

Termodinámica del cristal armónico

Sin embargo cuando $k \rightarrow 0$, $\omega_s(\mathbf{k}) \rightarrow 0$ para las 3 ramas acústicas. Los modos de larga longitud de onda contribuyen por chica que sea T . A bajas T podemos eliminar las ramas ópticas, quedarnos con el comportamiento de bajo k de las acústicas $\omega = c_s(\hat{\mathbf{k}})k$ y extender la integral a infinito.



Termodinámica del cristal armónico

$$c_v = \frac{\partial}{\partial T} \sum_s \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{\hbar c_s(\hat{\mathbf{k}})k}{e^{\hbar c_s(\hat{\mathbf{k}})k/k_B T} - 1} \quad d\mathbf{k} = k^2 dk d\Omega$$

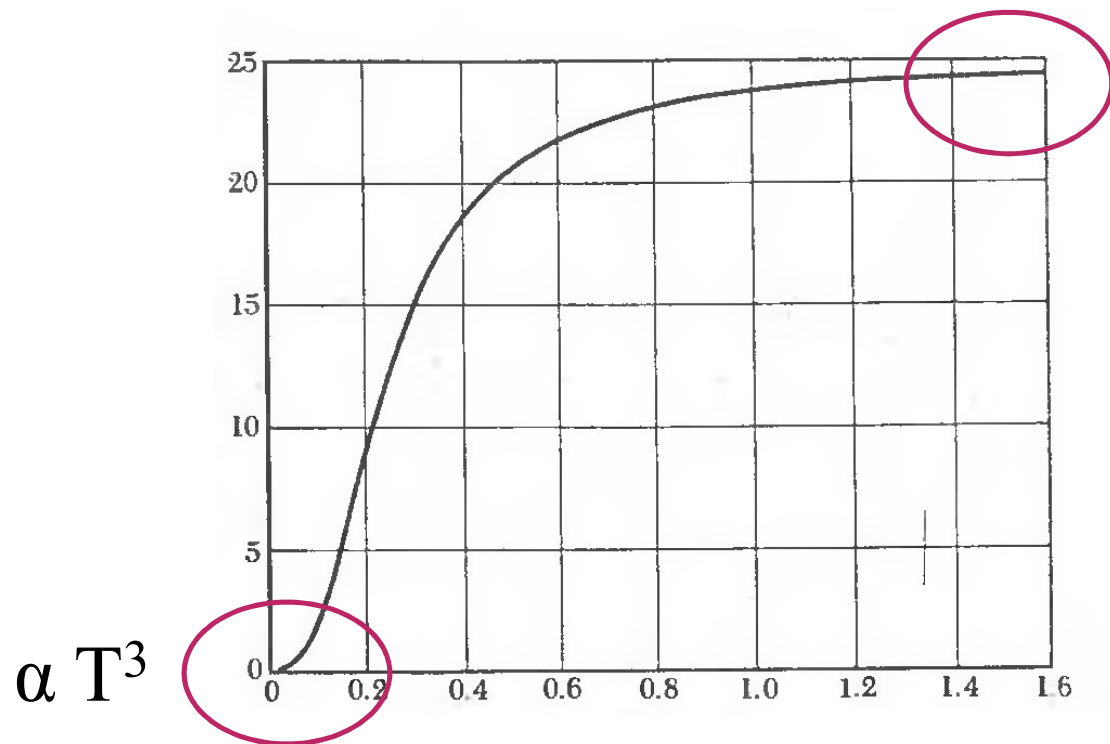
Cambiando variables a $\beta \hbar c_s(\hat{\mathbf{k}})k = x$

$$c_v = \frac{\partial}{\partial T} \frac{(k_B T)^4}{(\hbar c)^3} \frac{3}{2\pi^2} \int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1}, \quad \frac{1}{c^3} = \frac{1}{3} \sum_s \int \frac{d\Omega}{4\pi} \frac{1}{c_s(\hat{\mathbf{k}})^3}$$

$$\int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \sum_{n=1}^\infty \int_0^\infty x^3 e^{-nx} dx = 6 \sum_{n=1}^\infty \frac{1}{n^4} = \frac{\pi^4}{15}$$

$$c_v \approx \frac{\partial}{\partial T} \frac{\pi^2}{10} \frac{(k_B T)^4}{(\hbar c)^3} = \frac{2\pi^2}{5} k_B \left(\frac{k_B T}{\hbar c} \right)^3$$

Termodinámica del cristal armónico

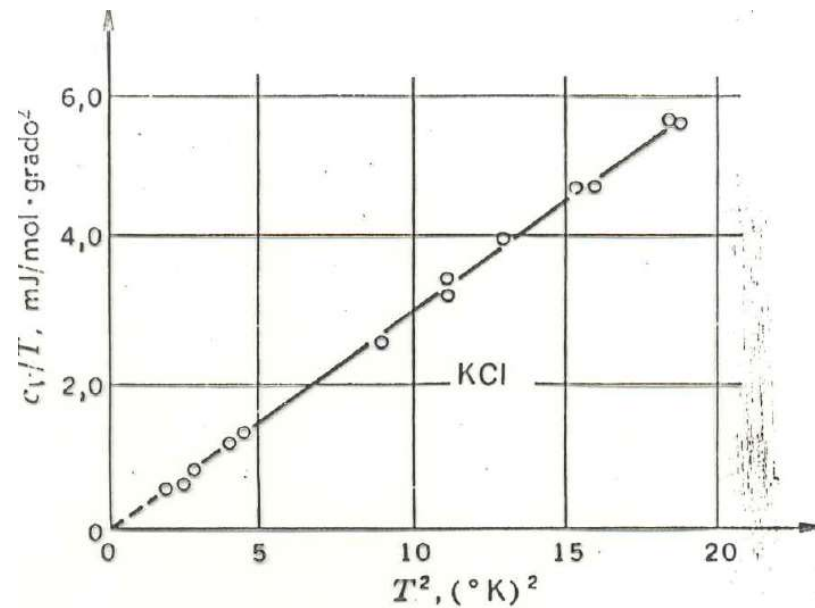


Ley de Dulong y Petit

A bajas temperaturas

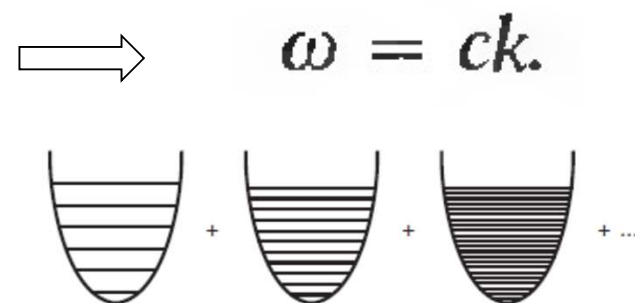
$$C_V = \alpha T^3$$

$$C_V / T = \alpha T^2$$



Modelo de Debye

Reemplazo las $\omega_\lambda(q)$ por 3 ramas con una misma relación de dispersión lineal



$$\int \frac{dq}{(2\pi)^3} \longrightarrow \int \frac{dq}{(2\pi)^3}$$

1 ZB

Esfera radio k_D

$$\text{Volumen 1ZB} = \frac{4\pi k_D^3}{3} \longrightarrow n = \frac{k_D^3}{6\pi^2} \longrightarrow \omega_D = k_D c$$

$$k_B \Theta_D = \hbar \omega_D = \hbar c k_D \quad \text{Temperatura de Debye}$$

Frecuencia de Debye

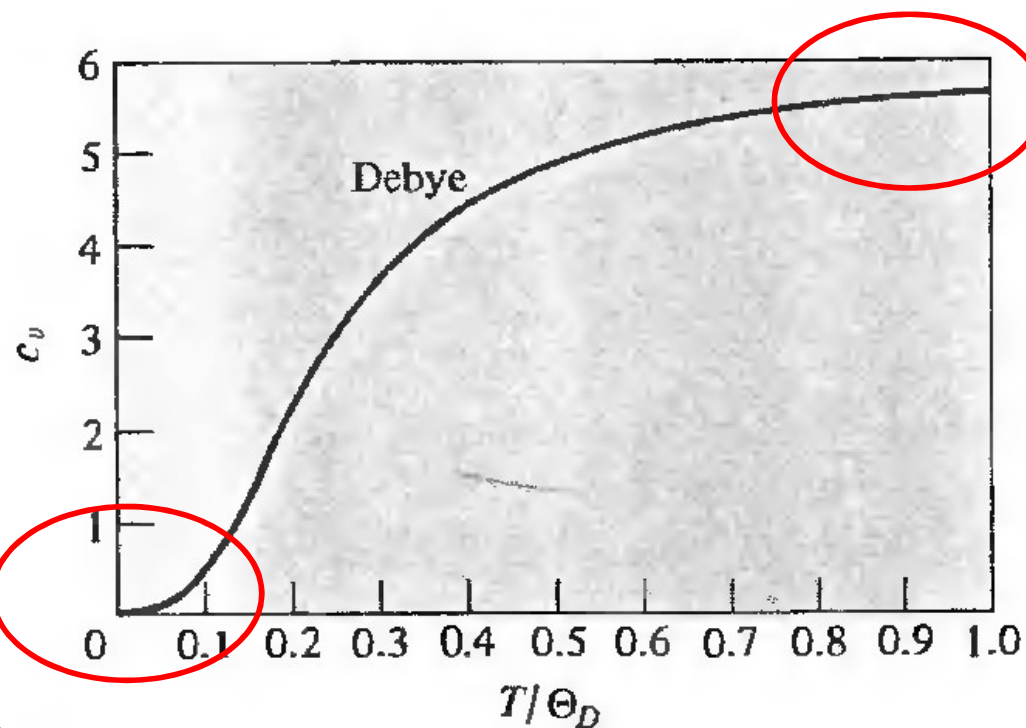
El calor especifico se calcula:

$$c_v = \frac{\partial}{\partial T} \frac{3\hbar c}{2\pi^2} \int_0^{k_D} \frac{k^3 dk}{e^{\beta\hbar ck} - 1}$$

Modelo de Debye

$$\hbar ck/k_B T = x,$$

$$c_v = 9nk_B \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3 \int_0^{\Theta_D/T} \frac{x^4 e^x dx}{(e^x - 1)^2}.$$



Baja
temperatura

Limite clásico
 $T \gg \Theta_D$

$$c_v = \frac{12\pi^4}{5} nk_B \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3 = 234 \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3 nk_B.$$

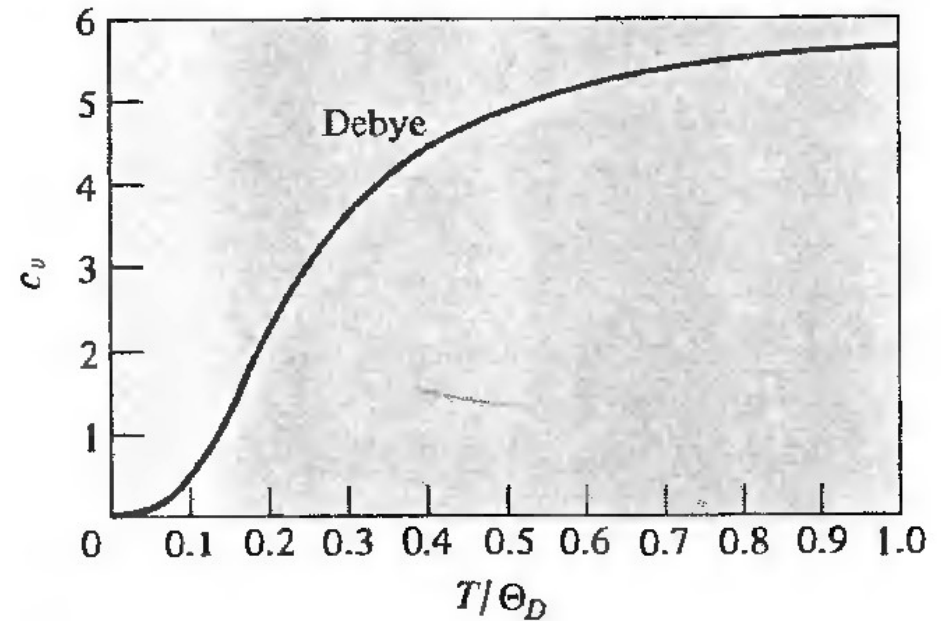
Modelo de Debye

Table 23.3

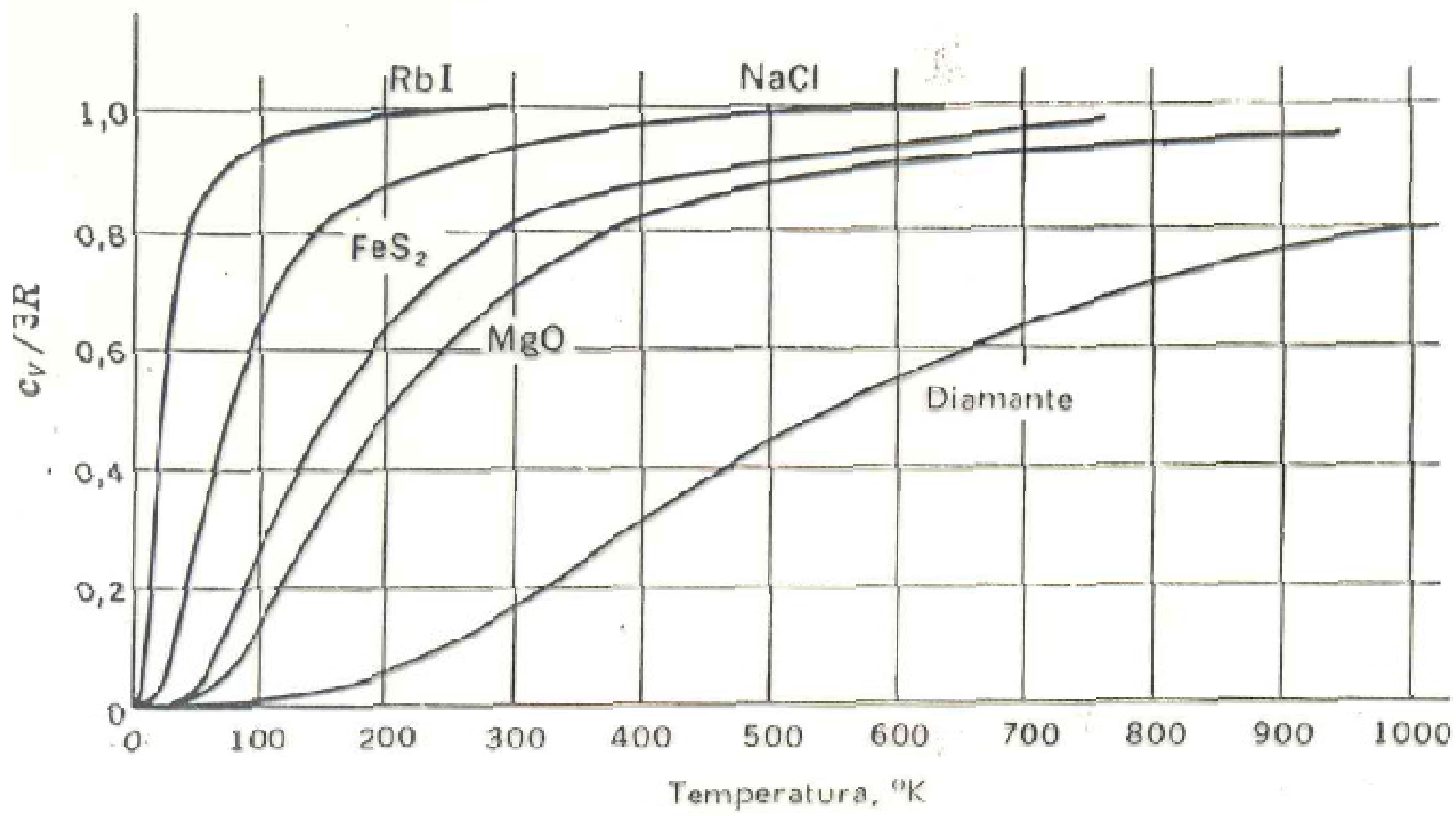
DEBYE TEMPERATURES FOR SELECTED ELEMENTS^a

ELEMENT	Θ_D (K)	ELEMENT	Θ_D (K)
Li	400	A	85
Na	150	Ne	63
K	100	Cu	315
Be	1000	Ag	215
Mg	318	Au	170
Ca	230	Zn	234
B	1250	Cd	120
Al	394	Hg	100
Ga	240	Cr	460
In	129	Mo	380
Tl	96	W	310
C (diamond)	1860	Mn	400
Si	625	Fe	420
Ge	360	Co	385
Sn (grey)	260	Ni	375
Sn (white)	170	Pd	275
Pb	88	Pt	230
As	285	La	132
Sb	200	Gd	152
Bi	120	Pr	74

Limite clásico
 $T \gg \Theta_D$



Modelo de Debye



Modelo de Einstein

N osciladores cuánticos \implies

$$\omega = \omega_E$$

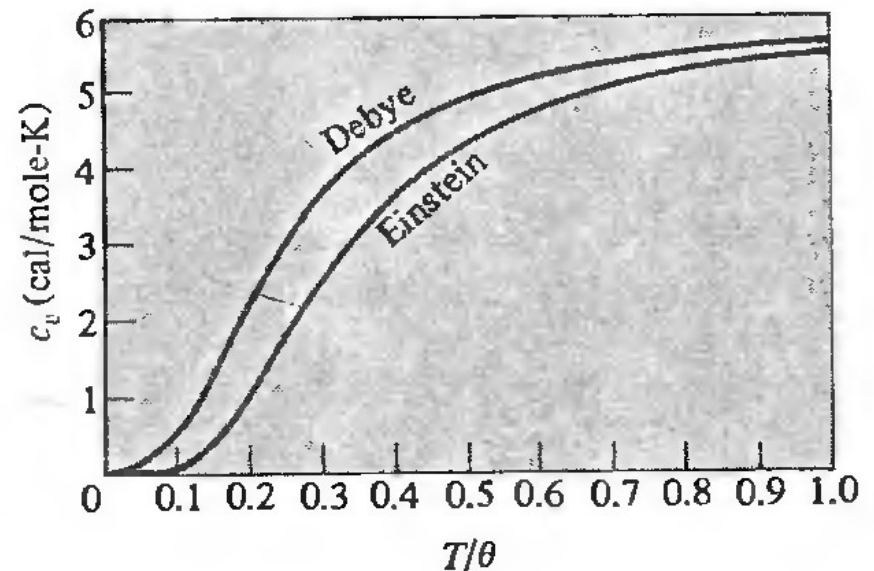


$$g_E(\omega) = \int \frac{dq}{(2\pi)^3} \delta(\omega - \omega_E) = \frac{N}{V} \delta(\omega - \omega_E)$$

$$E = \frac{n\hbar\omega_E}{e^{\hbar\omega_E/k_B T} - 1} \implies c_v^{\text{optical}} = nk_B \frac{(\hbar\omega_E/k_B T)^2 e^{\hbar\omega_E/k_B T}}{(e^{\hbar\omega_E/k_B T} - 1)^2}$$

$$C_V \rightarrow e^{-\hbar\omega_e/k_B T} \quad \text{for} \quad k_B T \ll \hbar\omega_e$$

$$C_V \rightarrow 3N_a k_B \quad \text{for} \quad k_B T \gg \hbar\omega_e$$



Modelos de Debye y Einstein

