

# Cuasipartículas

## Fonones

### *Bibliografía:*

Electrons, Phonons, Magnons

M. I. Kaganov

Mir Publishers, Moscow

First published in 1981

Págs. 109-135.

Fundamentos de Física Estadística y Térmica

F. Reif

McGraw-Hill, New York, 1965

Págs. 360-361, 408-420.

# Algunos ejemplos

Una cuasipartícula es una perturbación en un medio, que se comporta como una partícula y puede ser tratada como tal. Una analogía rudimentaria es la de una burbuja en una jarra de cerveza: la burbuja no es un objeto independiente sino un fenómeno, el desplazamiento por dióxido de carbono de un volumen de cerveza. Pero debido a las características de la superficie de líquido en contacto con el gas, la burbuja retiene una cierta identidad mientras sube y flota. Como una cuasipartícula, posee propiedades características de objetos, como tamaño, forma, energía, y momento.

*Britannica*

Cuasipartícula se refiere a un grupo de fenómenos discretos cuyo comportamiento incluye la interacción de una partícula con el sistema. La entidad se comporta de un modo similar a un partícula simple. El concepto es muy importante en física de la materia condensada, porque es una de las pocas formas conocidas de simplificar el problema mecánico – cuántico para muchos cuerpos.

*Wikipedia*

En sólidos, una **cuasipartícula electrón** es un electron afectado por las interacciones del sólido. La cuasipartícula electrón tiene la misma carga y espín de un electrón "normal" (partícula elemental) y es también un fermión. Sin embargo su masa puede diferir sustancialmente de la de un electrón normal y su campo eléctrico también está modificado debido al efecto de apantallamiento.

Un **hueco** es una cuasipartícula que consiste en la ausencia de un electrón en un dado estado; su uso es común en el contexto de estados vacíos en la banda de valencia de un semiconductor. Tiene carga opuesta a la del electrón.

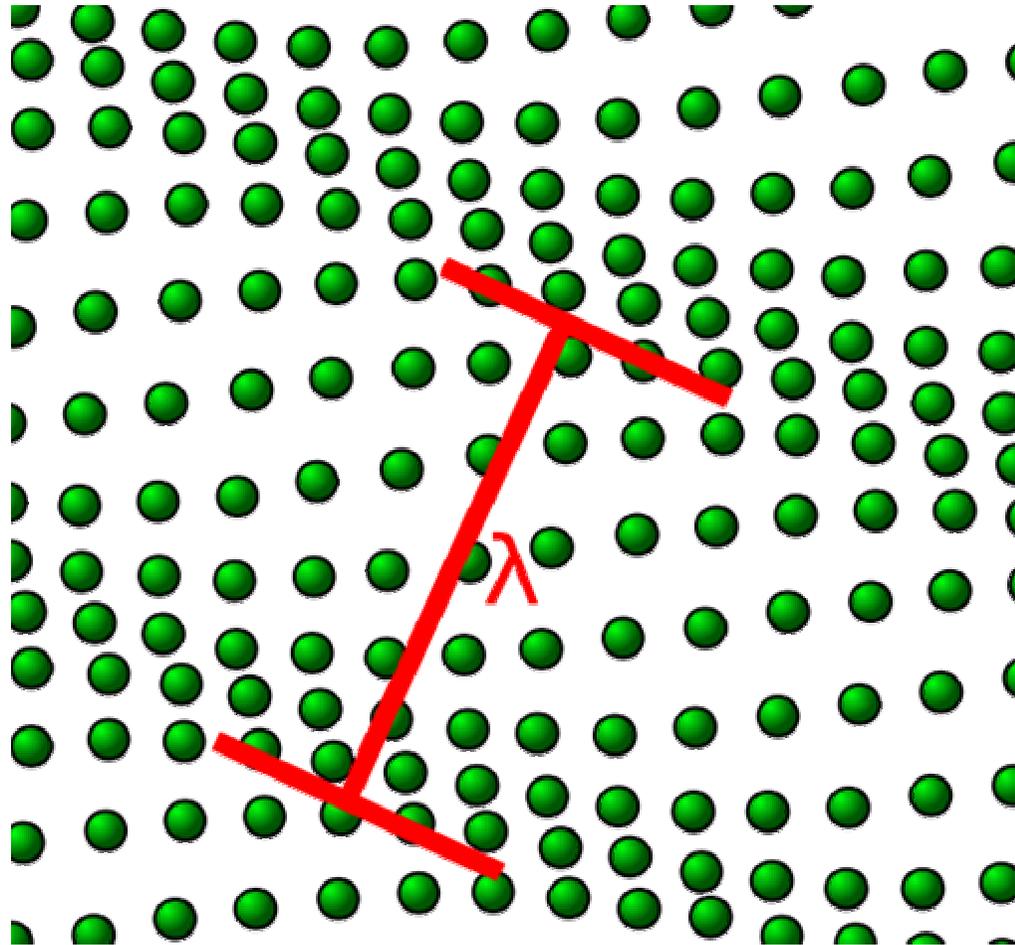
Un **fonón** es una excitación colectiva asociada con la vibración de los átomos en una estructura cristalina rígida. Es un cuanto de onda de sonido.

Un **magnón** es una excitación colectiva asociada con la estructura de espines electrónicos en una red cristalina. Es un cuanto de una onda de espín.

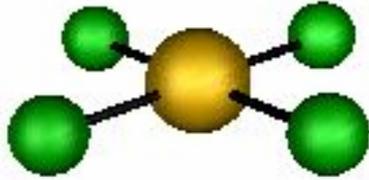
*Wikipedia*

Quasiparticle	Signification
<a href="#">Bipolaron</a>	A bound pair of two polarons
<a href="#">Chargon</a>	A quasiparticle produced as a result of electron spin-charge separation
<a href="#">Configuron</a>	An elementary configurational excitation in an amorphous material which involves breaking of a chemical bond
<a href="#">Electron hole</a> (hole)	A <i>lack</i> of electron in a <a href="#">valence band</a>
<a href="#">Exciton</a>	A bound state of an electron and a hole
<a href="#">Fracton</a>	A collective quantized <a href="#">vibration</a> on a substrate with a <a href="#">fractal</a> structure.
<a href="#">Holon</a>	A quasi-particle resulting as a result of electron spin-charge separation
<a href="#">Libron</a>	A quasiparticle associated with the librational motion of molecules in a molecular crystal.
<a href="#">Magnon</a>	A <a href="#">coherent excitation</a> of electron spins in a material
<a href="#">Phason</a>	Vibrational modes in a <a href="#">quasicrystal</a> associated with atomic rearrangements
<a href="#">Phonon</a>	Vibrational modes in a <a href="#">crystal lattice</a> associated with atomic shifts
<a href="#">Plasmon</a>	A coherent excitation of a <a href="#">plasma</a>
<a href="#">Polaron</a>	A moving charged quasiparticle that is surrounded by ions in a material
<a href="#">Polariton</a>	A mixture of photon with other quasiparticles
<a href="#">Roton</a>	Elementary excitation in <a href="#">superfluid Helium-4</a>
<a href="#">Soliton</a>	A self-reinforcing solitary excitation wave
<a href="#">Spinon</a>	A quasiparticle produced as a result of electron spin-charge separation

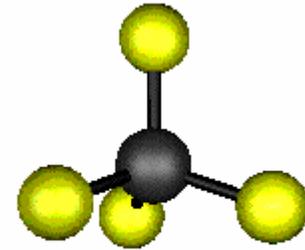
# Fonón



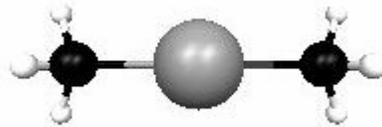
# Vibraciones moleculares y fonones



AuCl<sub>4</sub>



CF<sub>4</sub>



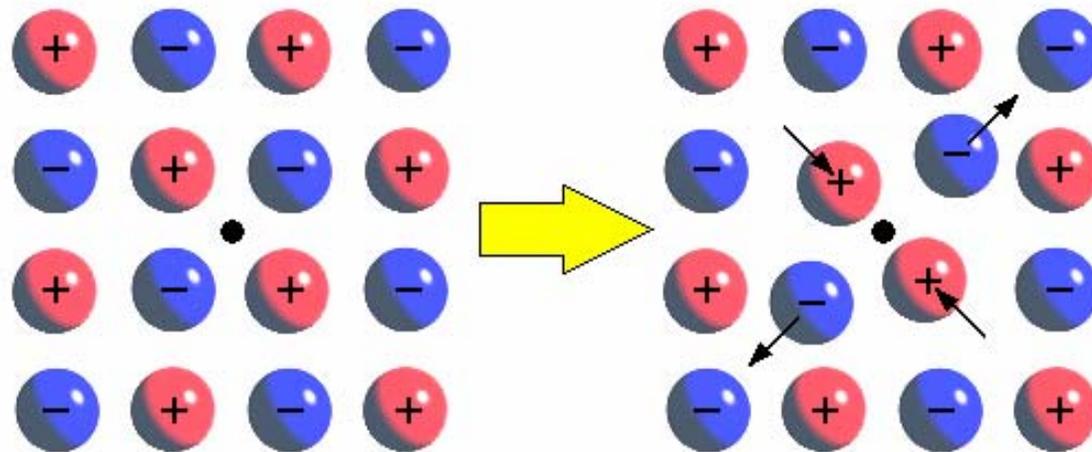
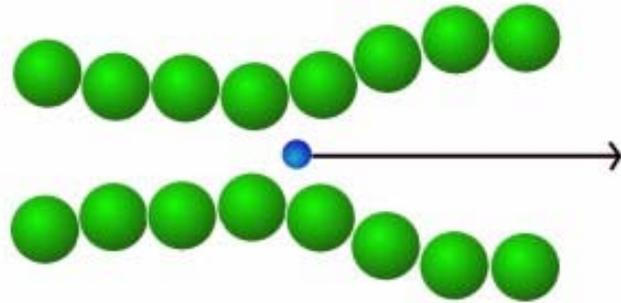
Hg(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>

Fonones (unidimensional  
longitudinal)

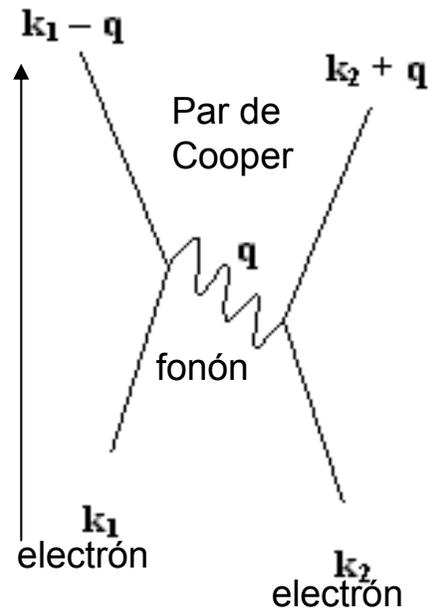
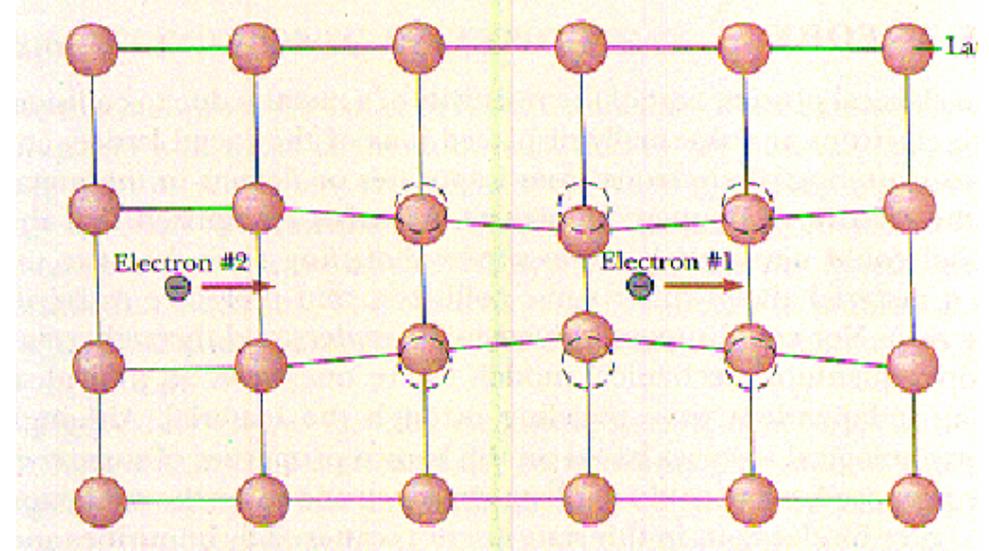
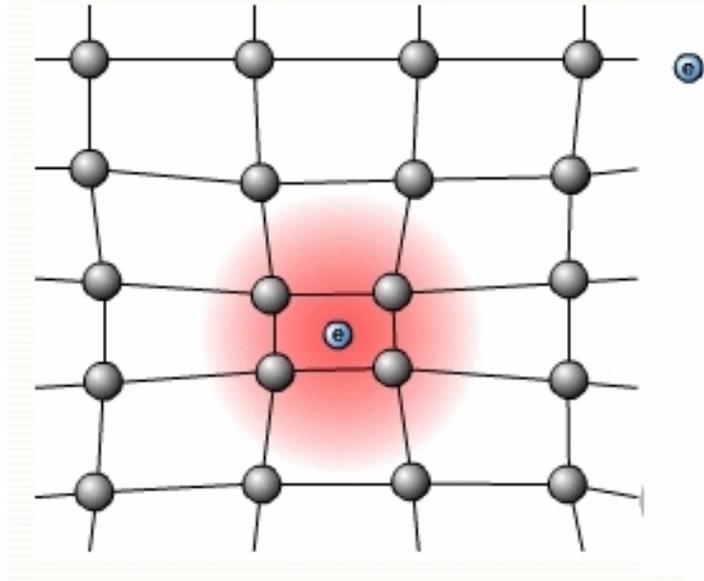
Fonones (unidimensional  
transversal)

Fonones (acústico-óptico)

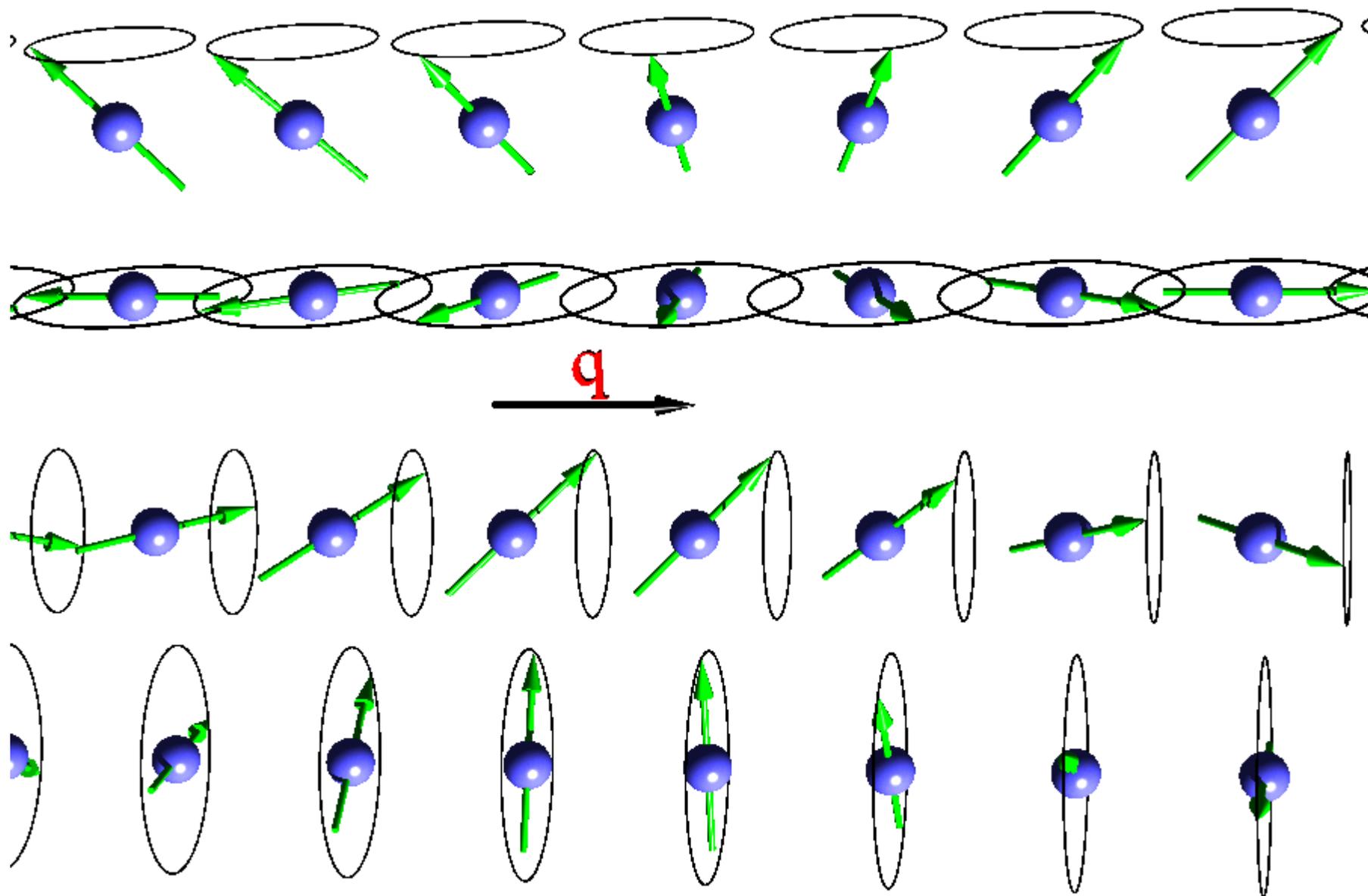
# Polarón



# Par de Cooper – Superconductor



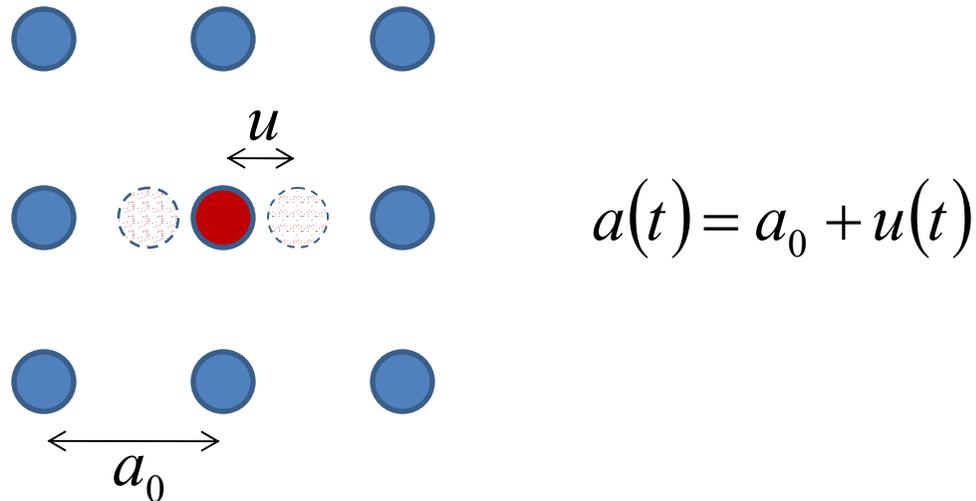
# Magnón



# Movimientos en un cristal

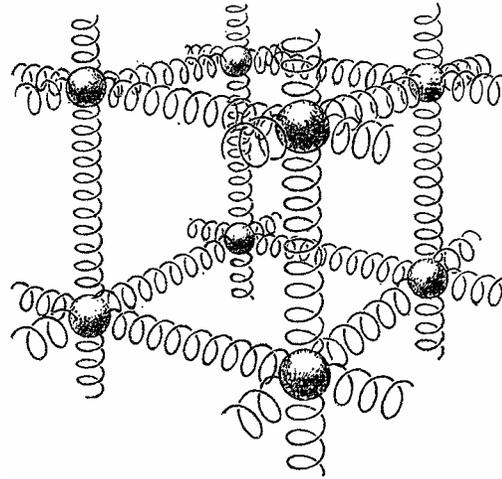
Los movimientos atómicos en un cristal son perpetuos. Ocurren oscilaciones a 0 K (similarmente al movimiento de punto cero de un oscilador armónico) y la cantidad de modos de oscilación y su amplitud se incrementan con la temperatura.

En general la amplitud de las vibraciones de punto cero es mucho menor que la separación interatómica, pero para las especies con menor masa atómica pueden ser considerables y para el He superan dicha separación. Esta es la razón por la cual a  $T \sim 0$  K, para solidificarlo se requiere una presión de 26 atm.



En todos los materiales, la amplitud de oscilación ocasionalmente alcanza el orden de la separación interatómica dando lugar al fenómeno de difusión. Éste tiene una fuerte dependencia con la temperatura.

Un modelo de sólido puede ser el de masas unidas por resortes:



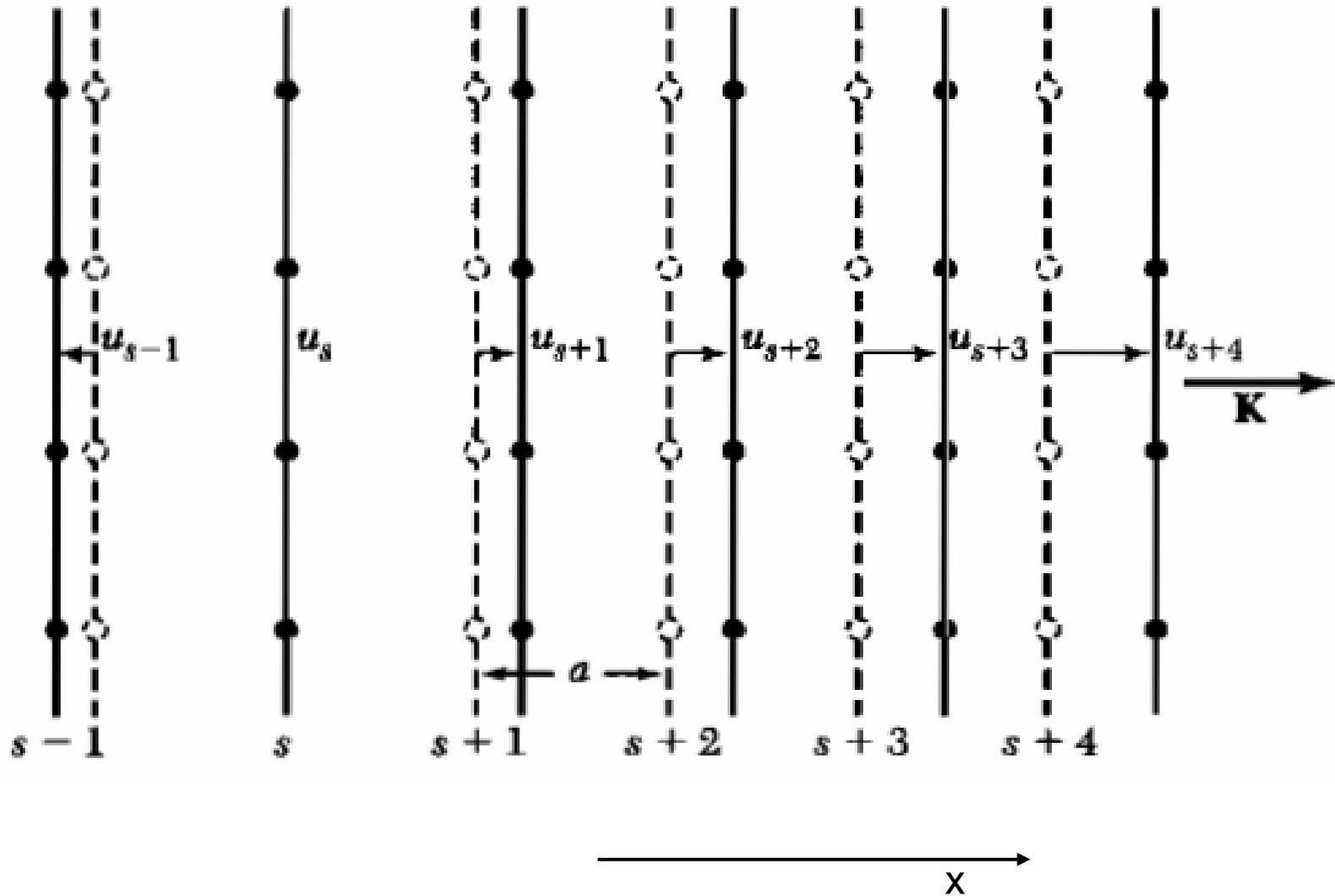
Si se desplaza una masa y luego se la libera, se moverá en la dirección de algún o algunos vecinos, provocando su movimiento, que a su vez inducirá el movimiento de vecinos cada vez más lejanos.

Como sabemos debe haber una relación entre  $\lambda$  y  $\omega$ , o entre  $k$  y  $\omega$ :

$$\omega = \omega(\vec{k})$$

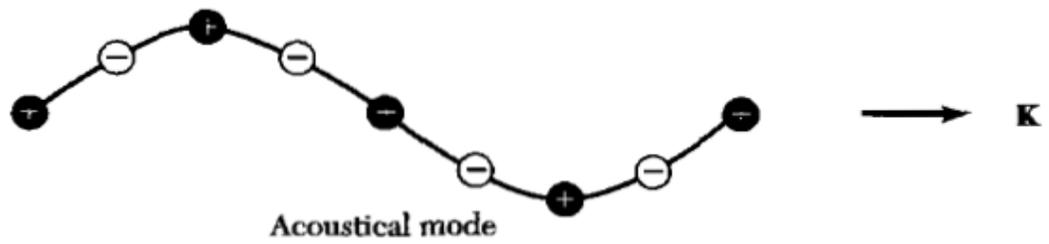
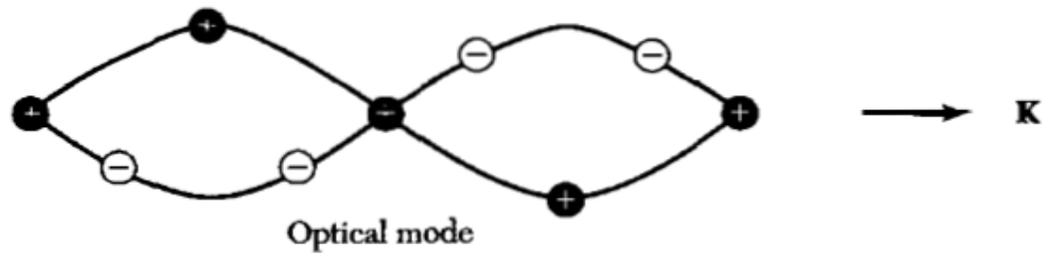
llamada relación de dispersión.

Onda plana en un cristal (dirección  $(1\ 1\ 0)$ )



El conocimiento de la ley de dispersión nos permite calcular propiedades del cristal: capacidad calorífica, dilatación térmica, conductividad del calor, etc. Esta relación puede visualizarse realizando una hipótesis simplificadora: átomos suficientemente distantes no interactúan directamente entre sí. Bajo estas condiciones se pueden inferir 3 consecuencias:

1. Si hay  $r$  especies diferentes en la celda unidad, se pueden propagar en el cristal  $3r$  diferentes tipos de ondas.
2. 3 de los  $3r$  tipos se denominan *modos acústicos*. Sus frecuencias son funciones decrecientes de  $k$  y tienden a anularse cuando  $k \rightarrow 0$ . Los restantes  $3(r - 1)$  modos se llaman modos ópticos. Los modos acústicos corresponden a una onda longitudinal (desplazamiento paralelo a  $k$ ) y dos transversales (desplazamiento perpendicular a  $k$ ). Los modos ópticos corresponden a oscilaciones entre átomos diferentes de la celda unidad y también incluyen ondas longitudinal y transversales.



modos [acústico-óptico](#)

3. Cada una de las funciones

$$\omega_j = \omega_j(\vec{k}); \quad j = 1, \dots, 3r$$

es una función periódica en el espacio recíproco:

$$\omega_j(\vec{k} + \vec{G}) = \omega_j(\vec{k}); \quad \forall j$$

$$\vec{G} = m_1 \vec{b}_1 + m_2 \vec{b}_2 + m_3 \vec{b}_3$$

Por las mismas razones mencionadas la clase anterior, es suficiente restringir el análisis a la 1ZB.

la ley de dispersión de las ondas de sonido es simple para longitudes de onda  $\lambda$  grandes comparadas con la constante de red  $a$ .

$$\omega = s_1 k \quad \textit{longitudinales}$$

$$\omega = s_2 k \quad \textit{transversales} \quad \lambda \gg a$$

$$s_1 > s_2$$

$$s = \frac{\omega}{k} = 2\pi f \frac{\lambda}{2\pi} = f\lambda \quad \textit{velocidad de onda}$$

$$\lambda \gg a; \lambda = \frac{2\pi}{k} \Rightarrow ak \ll 1$$

Los  $3(r - 1)$  modos ópticos describen vibraciones entre átomos dentro de la celda unidad. Las frecuencias de estas vibraciones son altas, del orden de las frecuencias ópticas infrarrojas.

De lo que hemos analizado, concluimos que los átomos no son osciladores independientes, están “acoplados” a otros átomos.

Sus movimientos generan ondas y cada onda tiene una frecuencia  $\omega$  definida. Es posible tratar a estos modos colectivos de frecuencia definida como osciladores no acoplados (independientes). Entonces la energía vibracional de un cristal es la suma de las energías de los osciladores individuales.

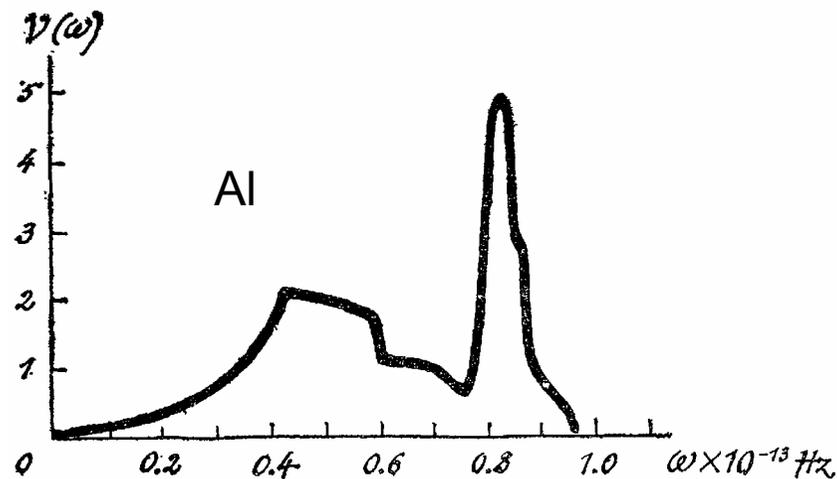
Cada cuanto del oscilador de frecuencia  $\omega_j(\mathbf{k})$  es una forma elemental de oscilación del cristal: un **fonón**, e involucra a **todos** los átomos del sólido.

La energía vibracional de los átomos **interactuantes** es la suma de las energías de los osciladores **independientes**. Cada oscilador es un elemento estructural del movimiento atómico en los cristales.

Desde el punto de vista vibracional un sólido es un “gas” ideal de **fonones**.

Una información importante para obtener propiedades de los cristales como el calor específico, es la densidad de fonones. La definimos como el número  $\sigma(\omega)$  de vectores de onda  $k$  que hay en el intervalo  $\omega, \omega + d\omega$ .

La función  $\sigma(\omega)$  experimental es compleja:



Un tratamiento teórico relativamente sencillo es la aproximación de Debye. En ésta se supone que la aproximación de grandes longitudes de onda (baja energía) es válida en todo el rango de posibles oscilaciones (frecuencias).

Las expresiones

$$\omega = s_1 k \quad \textit{longitudinales}$$

$$\omega = s_2 k \quad \textit{transversales} \quad \lambda \gg a$$

$$s_1 > s_2$$

Implican que las ondas que se propagan en el cristal son idénticas a las ondas en un continuo con velocidades  $s_1, s_2$ :

$$\vec{u}_1(\vec{r}, t) = \vec{u}_{10} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}$$

$$\vec{u}_2(\vec{r}, t) = \vec{u}_{20} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}$$

$$u_3(\vec{r}, t) = u_2(\vec{r}, t)$$

Esta suposición es correcta cuando  $\lambda \gg a$ , pero en el modelo de Debye se extiende a todo  $\lambda$  hasta la longitud de onda de corte  $\lambda = 2a$ .

Para resolver el problema debemos establecer condiciones de contorno para las ondas. Considerando el sólido como un prisma rectangular de lados

$$L_x = N_x a_x; \quad L_y = N_y a_y; \quad L_z = N_z a_z$$

podemos elegir condiciones periódicas (considerando que se formarán ondas estacionarias, también podríamos usar condiciones que impliquen nodos o vientres en los bordes, todos estos tratamientos llevan a conclusiones equivalentes). Escribimos  $\mathbf{u}$  como:

$$\vec{u}_j(\vec{r}, t) = \vec{u}_j(x, y, z, t) = \vec{u}_{j0} e^{i(k_x x + k_y y + k_z z - \omega t)}$$

e imponemos las condiciones periódicas

$$\vec{u}_j(x + L_x, y, z, t) = \vec{u}_j(x, y, z, t)$$

$$\vec{u}_j(x, y + L_y, z, t) = \vec{u}_j(x, y, z, t)$$

$$\vec{u}_j(x, y, z + L_z, t) = \vec{u}_j(x, y, z, t)$$

Que a su vez implican

$$k_x = \frac{2\pi}{L_x} n_x; \quad k_y = \frac{2\pi}{L_y} n_y; \quad k_z = \frac{2\pi}{L_z} n_z$$

Ahora contaremos estados, para eso invertimos las relaciones anteriores

$$n_x = \frac{L_x}{2\pi} k_x; \quad n_y = \frac{L_y}{2\pi} k_y; \quad n_z = \frac{L_z}{2\pi} k_z$$



$$dn_x = \frac{L_x}{2\pi} dk_x; \quad dn_y = \frac{L_y}{2\pi} dk_y; \quad dn_z = \frac{L_z}{2\pi} dk_z$$

Y de aquí deducimos la densidad de estados  $\sigma$ .

$$\sigma d^3 \vec{k} = dn_x dn_y dn_z = \frac{L_x L_y L_z}{(2\pi)^3} dk_x dk_y dk_z = \frac{V}{(2\pi)^3} dk_x dk_y dk_z$$

Teniendo en cuenta

$$dk_x dk_y dk_z = d^3 \vec{k} = k^2 d\Omega dk$$

$$d\Omega = \sin \theta d\theta d\phi$$

e integrando sobre el ángulo sólido

$$\sigma_k dk = \frac{4\pi V}{(2\pi)^3} k^2 dk = \frac{V}{2\pi^2} k^2 dk$$

Para la onda longitudinal

$$\omega = s_1 k \Rightarrow dk = \frac{d\omega}{s_1}$$



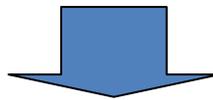
$$\sigma_\omega^l d\omega = \frac{V}{2\pi^2 s_1^3} \omega^2 d\omega$$

Para las ondas transversales aparece un factor 2

$$\sigma_{\omega}^t d\omega = \frac{2V}{2\pi^2 s_2^3} \omega^2 d\omega$$

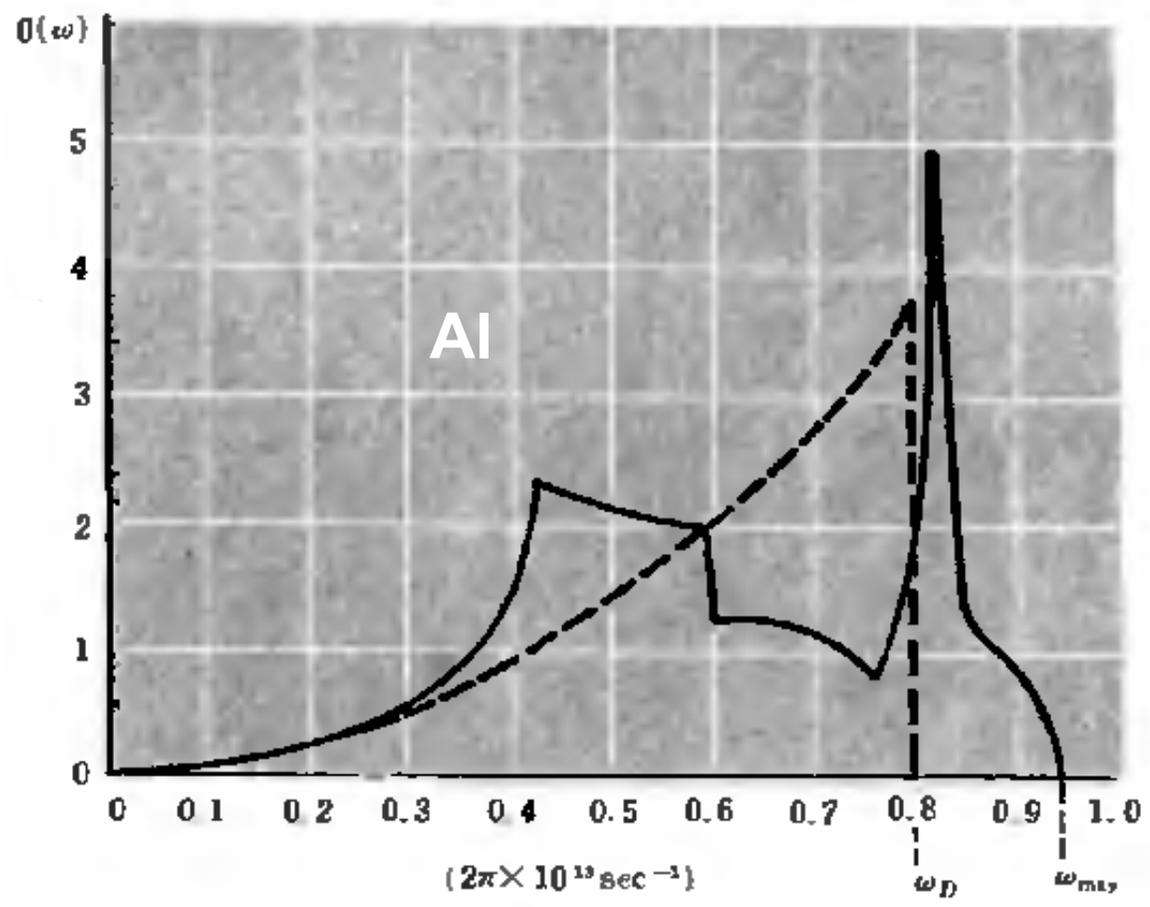
Finalmente nos queda para la densidad total

$$\sigma_{\omega} d\omega = (\sigma_{\omega}^l + \sigma_{\omega}^t) d\omega = \frac{V}{2\pi^2} \left( \frac{1}{s_1^3} + \frac{2}{s_2^3} \right) \omega^2 d\omega = \frac{3V}{2\pi^2 \langle s \rangle^3} \omega^2 d\omega$$



$$\frac{dn}{d\omega} = \sigma_{\omega} = \frac{3V}{2\pi^2 \langle s \rangle^3} \omega^2$$

$3/\langle s \rangle^3$  reemplaza al paréntesis con  $s_1$  y  $s_2$ .



Si el cristal está formado por celdas primitivas el número total de átomos es:

$$N = N_x N_y N_z$$

Cada uno de ellos puede oscilar en cualquiera de las 3 direcciones  $x, y, z$ . Se trata entonces de un sistema de  $3N$  osciladores **acoplados**. Al pasar a los modos **desacoplados** (normales) tendremos también  $3N$  osciladores (ahora colectivos). Ello implica

$$\int \sigma_\omega d\omega = 3N$$

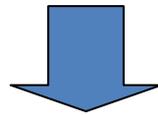
## Disgresión: paso de modos acoplados a modos desacoplados (normales)

Dos osciladores atómicos acoplados



$$\mathcal{H}_0 = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{1}{2} Cx_1^2 + \frac{p_2^2}{2m} + \frac{1}{2} Cx_2^2$$

$$\mathcal{H}_1 = -\frac{2e^2 x_1 x_2}{R^3}$$



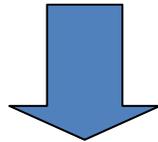
$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1 = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{1}{2} Cx_1^2 + \frac{p_2^2}{2m} + \frac{1}{2} Cx_2^2 - \frac{2e^2 x_1 x_2}{R^3}$$

$$x_s = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 + x_2)$$

$$p_s = \frac{1}{\sqrt{2}}(p_1 + p_2)$$

$$x_a = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 - x_2)$$

$$p_a = \frac{1}{\sqrt{2}}(p_1 - p_2)$$



$$\mathcal{H} = \frac{p_s^2}{2m} + \frac{1}{2}C_s x_s^2 + \frac{p_a^2}{2m} + \frac{1}{2}C_a x_a^2$$

$$C_s = C - \frac{2e}{R^3}; \quad C_a = C + \frac{2e}{R^3}$$

Dos osciladores colectivos desacoplados

Volvemos...

$$\int_0^{\infty} \sigma_{\omega} d\omega = 3N \quad \Rightarrow \quad \int_0^{\omega_D} \sigma_{\omega} d\omega = 3N$$

$\omega_D$  es la frecuencia de corte. Corresponde a

$$\omega_D \Leftrightarrow \lambda_D = 2a$$

frecuencia máxima

longitud de onda  
mínima

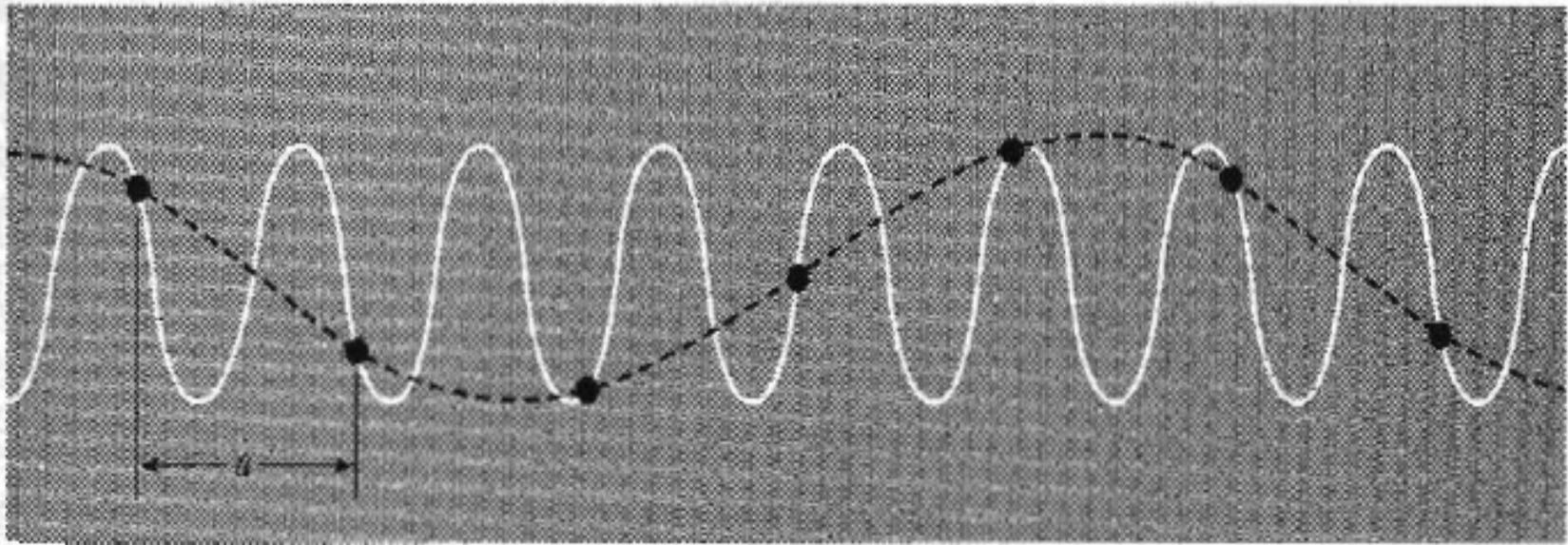
*usando*

$$\sigma_{\omega} = \frac{3V}{2\pi^2 \langle s \rangle^3} \omega^2$$



$$\int_0^{\omega_D} \frac{3V}{2\pi^2 \langle s \rangle^3} \omega^2 d\omega = \frac{V}{2\pi^2 \langle s \rangle^3} \frac{\omega_D^3}{3} = 3N \Rightarrow \omega_D = \langle s \rangle \left( 6\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{1/3}$$

$$\omega_D \approx 10^3 \frac{m}{s} \left( 6 \times 10 \times 5 \times 10^{28} m^{-3} \right)^{1/3} \approx 1.44 \times 10^{13} s^{-1}$$



$$\omega_D \Leftrightarrow \lambda_D = 2a$$

longitud de onda  
mínima

Vamos a evaluar el calor específico del cristal. Previamente revisamos el conocimiento que existía antes del desarrollo de la física cuántica, resumido en la ley de Dulong y Petit.

### Dulong and Petit's Data on the Molar Heat Capacities of Solid Elements<sup>a,b</sup>

Element	Gram heat capacity (J deg <sup>-1</sup> g <sup>-1</sup> )	Atomic weight	Molar heat capacity (J deg <sup>-1</sup> mole <sup>-1</sup> )
Bi	0.120	212.8	25.64
Au	0.125	198.9	24.79
Pt	0.133	188.6	25.04
Sn	0.215	117.6	25.30
Zn	0.388	64.5	25.01
Ga	0.382	64.5	24.60
Cu	0.397	63.31	25.14
Ni	0.433	59.0	25.56
Fe	0.460	54.27	24.98
Ca	0.627	39.36	24.67
S	0.787	32.19	25.30

<sup>a</sup>Reproduced by permission from J. B. Conant, *Harvard Case Histories in Experimental Science*, Harvard University Press, Cambridge, 1957, Vol. 1, p. 305.

<sup>b</sup>All data are the original values (with atomic weights changed to a scale in which O = 16.0, and calories converted to joules). If you use modern atomic weights rather than Dulong and Petit's as given in this table, does this make the molar heat capacities more nearly constant?

Para obtener  $C_V$  vamos a calcular la función de partición, de allí deduciremos la energía media del sistema de osciladores y luego el calor específico:

$$Z \rightarrow \langle E \rangle = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \rightarrow C_V = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T}; \quad \beta = \frac{1}{kT}$$

Para calcular  $Z$  partimos de la existencia de los  $3N$  osciladores independientes, a los cuales identificamos con el índice  $r$

$$\omega_r \Leftrightarrow r = 1, 2, \dots, 3N$$

Para cada uno de ellos la energía satisface:

$$\varepsilon_{n_r} = \hbar\omega_r \left( n_r + 1/2 \right) \Leftrightarrow n_r = 1, 2, \dots, \infty$$

(Notar que aparte de la energía de punto cero tenemos  $n_r$  veces la energía  $\hbar\omega_r$ , o  $n_r$  fonones de frecuencia  $\omega_r$ )

Para el conjunto de los  $3N$  osciladores la energía es simplemente la suma:

$$E_{n_1, n_2, \dots, n_{3N}} = \sum_{r=1}^{3N} \varepsilon_{n_r} = \sum_{r=1}^{3N} \hbar \omega_r (n_r + 1/2) = \frac{1}{2} \sum_{r=1}^{3N} \hbar \omega_r + \sum_{r=1}^{3N} \hbar \omega_r n_r$$

$$E_{n_1, n_2, \dots, n_{3N}} = E_0 + \sum_{r=1}^{3N} \hbar \omega_r n_r; \quad E_0 = \frac{1}{2} \sum_{r=1}^{3N} \hbar \omega_r$$

Ahora construimos  $Z$

$$Z = \sum_{\{n_1, n_2, \dots, n_{3N}\}} e^{-\beta E_{n_1, n_2, \dots, n_{3N}}} = e^{-\beta E_0} \sum_{\{n_1, n_2, \dots, n_{3N}\}} e^{-\beta n_1 \hbar \omega_1} e^{-\beta n_2 \hbar \omega_2} \dots e^{-\beta n_{3N} \hbar \omega_{3N}}$$

$$Z = e^{-\beta E_0} \sum_{n_1} e^{-\beta n_1 \hbar \omega_1} \sum_{n_2} e^{-\beta n_2 \hbar \omega_2} \dots \sum_{n_{3N}} e^{-\beta n_{3N} \hbar \omega_{3N}}$$

$$Z = e^{-\beta E_0} \sum_{n_1} e^{-\beta n_1 \hbar \omega_1} \sum_{n_2} e^{-\beta n_2 \hbar \omega_2} \dots \sum_{n_{3N}} e^{-\beta n_{3N} \hbar \omega_{3N}}$$



$$Z = e^{-\beta E_0} \left( \frac{1}{1 - e^{-\beta \hbar \omega_1}} \right) \left( \frac{1}{1 - e^{-\beta \hbar \omega_2}} \right) \dots \left( \frac{1}{1 - e^{-\beta \hbar \omega_{3N}}} \right)$$



$$\ln Z = -\beta E_0 - \sum_{r=1}^{3N} \ln(1 - e^{-\beta \hbar \omega_r})$$

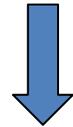
Pasamos ahora al continuo usando la densidad de estados:  $\frac{dn}{d\omega} = \sigma_\omega$

$$\ln Z = -\beta E_0 - \sum_{r=1}^{3N} \ln(1 - e^{-\beta \hbar \omega_r}) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} -\beta E_0 - \int_0^\infty \ln(1 - e^{-\beta \hbar \omega(n)}) dn$$

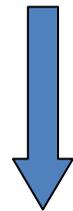
$$\ln Z = -\beta E_0 - \int_0^\infty \ln(1 - e^{-\beta \hbar \omega(n)}) dn$$


$$dn = \sigma_\omega d\omega$$

$$\ln Z = -\beta E_0 - \int_0^{\omega_D} \ln(1 - e^{-\beta \hbar \omega}) \sigma(\omega) d\omega$$



$$\langle E \rangle = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = E_0 + \int_0^{\omega_D} \frac{\hbar \omega e^{-\beta \hbar \omega}}{1 - e^{-\beta \hbar \omega}} \sigma(\omega) d\omega = E_0 + \int_0^{\omega_D} \frac{\hbar \omega}{e^{\beta \hbar \omega} - 1} \sigma(\omega) d\omega$$



$$C_V = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = -k\beta^2 \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial \beta}$$

$$C_V = k \int_0^{\omega_D} \frac{e^{\beta \hbar \omega}}{(e^{\beta \hbar \omega} - 1)^2} (\beta \hbar \omega)^2 \sigma(\omega) d\omega$$

$$C_V = k \int_0^{\omega_D} \frac{e^{\beta \hbar \omega}}{(e^{\beta \hbar \omega} - 1)^2} (\beta \hbar \omega)^2 \sigma(\omega) d\omega$$

$$\sigma = \frac{3V}{2\pi^2 \langle s \rangle^3} \omega^2 \quad x = \beta \hbar \omega$$

$$C_V = k \frac{3V}{2\pi^2 (\langle s \rangle \beta \hbar)^3} \int_0^{x_D} \frac{e^x}{(e^x - 1)^2} x^4 dx$$

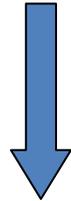
$$V = 6\pi^2 N \left( \frac{\langle s \rangle}{\omega_D} \right)^3$$

$$C_V = 3Nk \underbrace{\frac{3}{x_D^3} \int_0^{x_D} \frac{e^x}{(e^x - 1)^2} x^4 dx}_{f_D(x_D)}$$

$$C_V = 3Nk \frac{3}{x_D^3} \int_0^{x_D} \frac{e^x}{(e^x - 1)^2} x^4 dx$$

Definimos la temperatura de Debye  $\theta_D$  mediante

$$x_D = \beta \hbar \omega_D = \frac{\hbar \omega_D}{kT} = \frac{\theta_D}{T} \quad \Rightarrow \quad \theta_D = \frac{\hbar \omega_D}{k}$$



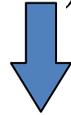
$$C_V = 3Nk \left[ 3 \left( \frac{T}{\theta_D} \right)^3 \int_0^{\theta_D/T} \frac{e^x}{(e^x - 1)^2} x^4 dx \right]$$

Vamos a analizar los límites de alta y baja temperatura de la expresión anterior

$$C_V = 3Nk \left[ 3 \left( \frac{T}{\theta_D} \right)^3 \int_0^{\theta_D/T} \frac{e^x}{(e^x - 1)^2} x^4 dx \right]$$

*si*  $T \gg \theta_D$

$$\int_0^{\theta_D/T} \frac{e^x}{(e^x - 1)^2} x^4 dx \rightarrow \int_0^{x_D \ll 1} \frac{e^x}{(e^x - 1)^2} x^4 dx \approx \int_0^{x_D \ll 1} x^2 dx = \frac{x_D^3}{3} = \frac{1}{3} \left( \frac{\theta_D}{T} \right)^3$$



$$C_V = 3Nk 3 \left( \frac{T}{\theta_D} \right)^3 \frac{1}{3} \left( \frac{\theta_D}{T} \right)^3 = 3Nk$$

Para un mol de materia

$$C_V = 3N_{Av}k = 3R \approx 24.2 J / molK$$

$si T \gg \theta_D$

$$C_V = 3N_{Av}k = 3R \approx 24.2 J / molK$$

Element	Molar heat capacity (J deg <sup>-1</sup> mole <sup>-1</sup> )
Bi	25.64
Au	24.79
Pt	25.04
Sn	25.30
Zn	25.01
Ga	24.60
Cu	25.14
Ni	25.56
Fe	24.98
Ca	24.67
S	25.30

Ley de Dulong y Petit

$$C_V = 3Nk \left[ 3 \left( \frac{T}{\theta_D} \right)^3 \int_0^{\theta_D/T} \frac{e^x}{(e^x - 1)^2} x^4 dx \right]$$

$$\text{si } T \ll \theta_D \Rightarrow \theta_D / T \rightarrow \infty$$

$$I \approx \int_0^{\infty} \frac{e^x}{(e^x - 1)^2} x^4 dx = \gamma \text{ (cte)}$$



$$C_V \propto T^3$$



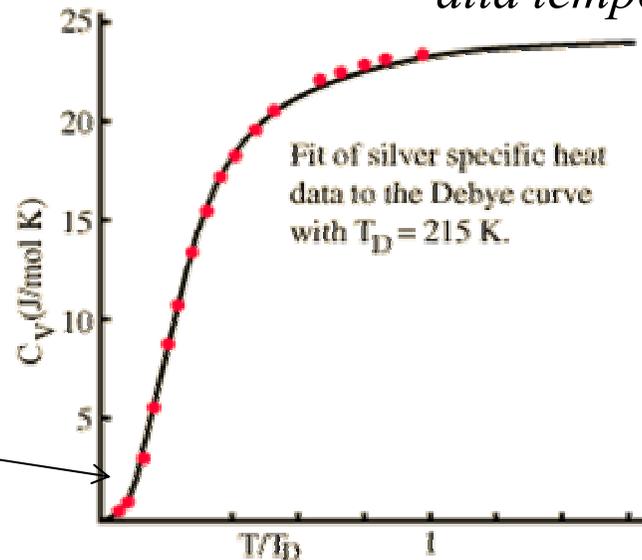
$$C_V \approx \frac{12\pi^4}{5} Nk \left( \frac{T}{\theta_D} \right)^3$$

$$C_V \propto T^3$$

*baja temperatura*

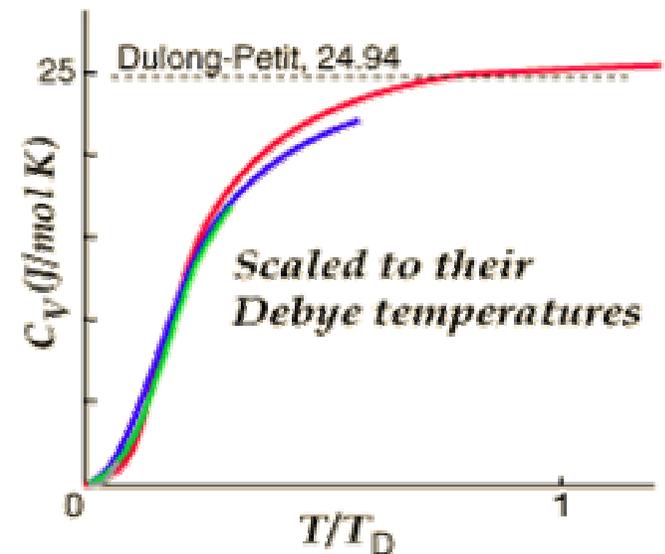
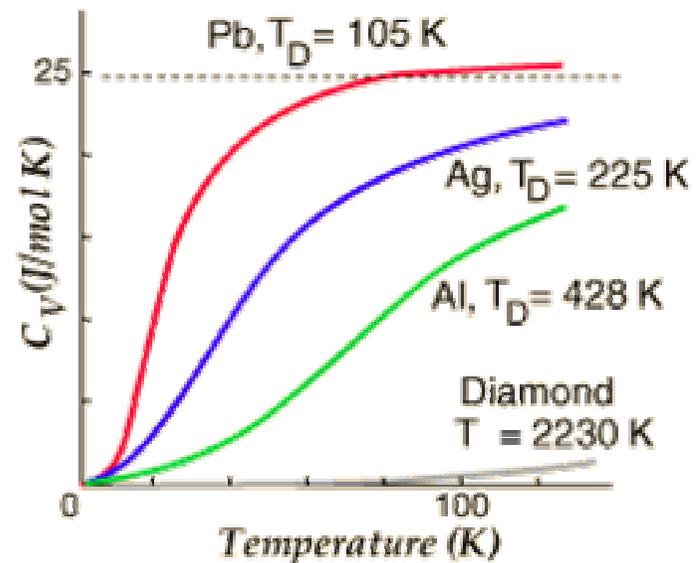
$$C_V \approx 3R$$

*alta temperatura*



<u>Aluminium</u>	428 K	<u>Silicon</u>	645 K
<u>Cadmium</u>	209 K	<u>Silver</u>	225 K
<u>Chromium</u>	630 K	<u>Tantalum</u>	240 K
<u>Copper</u>	343.5 K	<u>Tin (white)</u>	200 K
<u>Gold</u>	165 K	<u>Titanium</u>	420 K
<u>Iron</u>	470 K	<u>Tungsten</u>	400 K
<u>Lead</u>	105 K	<u>Zinc</u>	327 K
<u>Manganese</u>	410 K	<u>Carbon</u>	2230 K
<u>Nickel</u>	450 K	<u>Ice</u>	192 K
<u>Platinum</u>	240 K		

Temperaturas de Debye



Si el cristal posee un sólo átomo por celda, la aproximación de Debye es satisfactoria. Si el cristal es más complejo, además de los osciladores con frecuencias continuas en  $0 < \omega < \omega_D$  (modos acústicos), hay que incluir  $(3r - 3)N$  osciladores con frecuencias discretas (modos ópticos).

### **Dualismo onda - partícula**

De acuerdo a de Broglie a cada onda le podemos asociar una partícula (en realidad una cuasipartícula) con energía y cantidad de movimiento:

$$\varepsilon = \hbar \omega_j(\vec{k}) \quad \vec{p} = \hbar \vec{k}$$

Esta cuasipartícula se denomina “fonón”. El fonón es la unidad elemental de la energía del cristal correspondiente a una frecuencia dada.

Como la energía de excitación de un oscilador cuántico es

$$\varepsilon_n = n\hbar\omega$$

El número  $n$  tiene un significado claro y preciso: es el número de fonones con la energía dada y momento

$$\vec{p} = \hbar \vec{k}(\omega)$$

Por otro lado, la expresión

$$\langle n \rangle = \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega} - 1}$$

Da cuenta del número medio de fonones con la cantidad de movimiento y la energía dadas. Por tal motivo

$$E_{\omega} = \frac{\hbar \omega}{e^{\beta \hbar \omega} - 1}$$

es la energía del conjunto de dichos fonones.

El número medio de fonones con frecuencia  $\omega$  en el volumen diferencial del espacio  $k$

$$4\pi k^2 dk$$

Viene dado por

$$\langle \mathcal{N}(\omega) \rangle = \frac{\sigma(\omega)}{e^{\beta \hbar \omega} - 1}$$

Este tratamiento nos permite tratar al sólido como a un gas de fonones. Este gas es el principal reservorio térmico del cristal.

Se trata de un gas inusual, ya que el número de fonones no es constante: depende fuertemente de la temperatura. Tiende a cero cuando  $T \rightarrow 0$  y a infinito cuando  $T \rightarrow \infty$ .

Por otro lado, cuanto mayor la temperatura mayor es la frecuencia máxima de fonones presentes en un número significativo.

$$\hbar\omega_{m\acute{a}x} \approx k_B T$$

Finalmente, en el caso en que

$$\hbar\omega_D \ll k_B T$$

el problema admite un tratamiento clásico, mientras que si

$$\hbar\omega_D \geq k_B T$$

requiere un tratamiento cuántico.

Fin Clase