

Se permite utilizar un libro de fórmulas y tablas matemáticas.

Cada pregunta puntúa hasta 2,5 puntos. Hay que aprobar cada parte (cuestiones y problemas) por separado.

Cuestiones: conteste razonadamente, ajustándose a las preguntas y explicando lo que haga.

Problemas: debe resolverlos, no sólo decir cómo se se podrían resolver ni poner la solución; hay que resolverlos realmente, explicando con claridad los pasos y discutir los resultados.

Recuerde definir **todas** las variables que use y **explicar** las aproximaciones, la notación y las fórmulas que utilice.

No haga números hasta haber obtenido una expresión algebraica (estime entonces en órdenes de magnitud).

CUESTIONES

C1.- Discuta cómo es la relación de dispersión $\omega^2(q)$ de un cristal tridimensional con base poliatómica.

Haga una representación gráfica detallada y explique la procedencia y sentido físico (clásico y cuántico) de cada uno de los rasgos característicos del espectro.

Nota: no se piden desarrollos matemáticos.

C2.- Supongamos un cristal unidimensional, formado por una cadena lineal de átomos monoelectrónicos.

Cuando los átomos están aislados, el estado fundamental E_0 del electrón de cada átomo viene definido por una función de onda $\phi(x)$.

Consideremos que sea posible que en el cristal puedan existir funciones de onda del tipo

$$\Phi(x) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N-1} e^{ikna} \phi(x - na).$$

¿Qué condición deben verificar esas funciones de onda $\Phi(x)$ para que de verdad sean funciones de onda del electrón en el cristal? ¿Se cumple en nuestro caso?

PROBLEMAS

P1.-

a) Haga una breve descripción de los siguientes conceptos:

- Red cristalina y red recíproca de un cristal.
- Celda de Wigner-Seitz. Zonas de Brillouin.

b) Un cristal de vanadio está orientado con su plano (110) perpendicularmente a un haz de rayos X. En el diagrama de difracción se observa que la difracción de primer orden se mide a un ángulo de Bragg de $20,2^\circ$. ¿Cuál es la longitud de onda de los rayos X mencionados?

P2.- a) Haciendo un muy breve resumen (sin detalles matemáticos) del modelo de Debye, obtenga la expresión de la temperatura de Debye.

b) Estime el valor de la temperatura de Debye de un cristal monatómico tridimensional, cuya distancia entre átomos (o iones) es a , una densidad ρ y módulo elástico G .

Datos: $a = 3,15 \text{ \AA}$, densidad $\rho = 10,22 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$, módulo elástico $G = 324 \text{ GPa}$.

Datos: $h = 6,63 \times 10^{-34} \text{ J s}$, $m_p = 1,67 \times 10^{-27} \text{ kg}$, $m_e = 9,11 \times 10^{-31} \text{ kg}$, $e = 1,6 \times 10^{-19} \text{ C}$,
 $R_\infty = 109737 \text{ cm}^{-1}$, $N_A = 60,2 \times 10^{22} \text{ mol}^{-1}$, $k_B = 1,38 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$, $1 \text{ eV} = 1,6 \times 10^{-19} \text{ J}$,
 $\mu_b = e\hbar/(2m_e) = 9,27 \times 10^{-24} \text{ J T}^{-1}$, $c = 3 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$, $a_o = 4\pi\epsilon_o\hbar^2/me^2 \simeq 0,52 \text{ \AA}$,
 $1/(4\pi\epsilon_o) = 9 \times 10^9 \text{ m}^3 \text{ kg s}^{-2} \text{ C}^{-2}$, $\lambda_C = h/(m_e c) = 0,024 \text{ \AA}$.