



UNIVERSIDAD
COMPLUTENSE
MADRID

2.- PROPIEDADES TÉRMICAS

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

FISICA DEL ESTADO SOLIDO II

2. Propiedades térmicas

- Capacidad Calorífica.
- Ley de Dulong y Petit
- Modelos clásicos de Debye y Einstein. Dilatación térmica.
- Conductividad térmica.
- Procesos de interacción entre fonones.
- Criterio de Lindemann.
- Efecto termoeléctrico.

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Capacidad Calorífica

□ Teoría clásica, la densidad de energía térmica viene dada por el principio de equipartición de la energía.

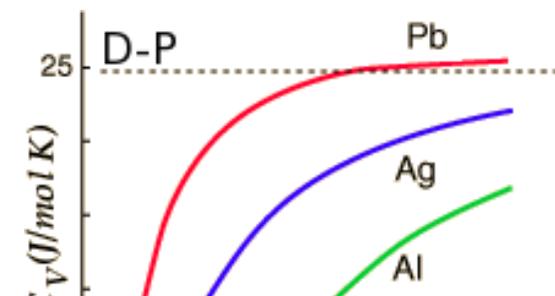
□ Para un cristal con N átomos en un volumen V , la densidad de energía térmica es: $u = u_{eq} + 3nk_B T$ (con $n = N/V$)

□ El calor específico es independiente de T : $c_v = 3nk_B$ (**LEY DE DULONG-PETIT 1819**). “ **El calor específico por ión es de $3k_B$** “

□ EXPERIMENTALMENTE

✓ Para T Bajas, C_v decrece tendiendo a 0

✓ Incluso a T altas parece que la tendencia de C_v no es el



CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Cartagena99

Capacidad Calorífica

- Desde el punto de vista cuántico. La densidad de energía

$$u = \frac{1}{V} \sum_i E_i e^{-\beta E_i} / \sum_i e^{-\beta E_i} = -\frac{1}{V} \frac{\partial}{\partial \beta} \ln \sum_i e^{-\beta E_i}$$

- La suma es sobre todos los estados estacionarios con energía:

$$E_i = \sum_{\mathbf{k}_s} (n_{\mathbf{k}_s}^i + \frac{1}{2}) \hbar \omega_s(\mathbf{k}), \quad n_{\mathbf{k}_s}^i = 0, 1, 2, \dots$$

- La densidad de energía interna será por tanto:

$$u = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_s} \hbar \omega_s(\mathbf{k}) [n_s(\mathbf{k}) + \frac{1}{2}]$$

- Donde $n_s(\mathbf{k}) = \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega_s(\mathbf{k})} - 1}$ es la función de distribución de Bose-Einstein

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Cartagena99

Capacidad Calorífica a T alta

- Por tanto el Calor Específico a volumen constante vendrá dado por

$$c_v = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}s} \frac{\partial}{\partial T} \frac{\hbar\omega_s(\mathbf{k})}{e^{\beta\hbar\omega_s(\mathbf{k})} - 1}$$

- CASOS INTERESANTES:

- ✓ Cuando $k_B T \gg \hbar\omega_s(k)$ todos los modos de vibración están excitados. Podemos hacer el siguiente cambio de variable ($\beta\hbar\omega_s(k) = x$) y la siguiente aproximación:

$$\frac{1}{e^x - 1} = \frac{1}{x} \left[1 - \frac{x}{2} + \frac{x^2}{12} + O(x^3) \right]$$

- ✓ Si nos quedamos en el primer término de la aproximación

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Capacidad Calorífica a T baja

$$\frac{1}{e^x - 1} = \frac{1}{x} \left[1 - \frac{x}{2} + \frac{x^2}{12} + O(x^3) \right]$$

- ✓ El segundo término es independiente de la temperatura.
- ✓ Podríamos tomar términos superiores para ver posibles correcciones pero dominarían los términos anarmónicos.

□ CASOS INTERESANTES:

- ✓ Si se considera un cristal suficientemente grande, el conjunto de vectores de onda es bastante denso en la 1ª zona de Brillouin. Entonces el calor específico se puede escribir como:

$$\frac{\partial}{\partial T} \sum_{\mathbf{k}} \int_0^{\infty} dk \quad \hbar \omega_s(\mathbf{k})$$

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Cartagena99

Capacidad Calorífica a T baja

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

- ✓ A temperaturas T suficientemente bajas, los modos $\hbar\omega_s(k) \gg k_B T$ no contribuirán. Esta condición la cumplirán los modos ópticos. Por lo que sólo los modos acústicos contribuirán al calor específico, incluso podemos decir que a cualquier T si la longitud de onda es suficientemente grande.

□ APROXIMACIONES

1. Ignoramos las ramas ópticas.
2. Usamos una relación de dispersión lineal $\omega_s(k) = v_g \cdot k$
3. Integramos a todo valor de k.

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Capacidad Calorífica a T intermedia

□ Los modelos de Einstein y Debye utilizan expresiones aproximadas para la relación de dispersión y así calcular el valor de la capacidad calorífica.

□ MODELO DE DEBYE

Debye reemplaza todas las ramas por 3 ramas acústicas, con una relación de dispersión lineal $\omega_s(\mathbf{k}) = c \cdot \mathbf{k}$ (donde $c = v_g$). Lo único que hay que tener en cuenta es que los límites de la integral no son los anteriores sino que se debe integrar sobre una esfera de radio $k_D = (6\pi^2 n)^{1/3}$

$$N(2\pi)^3/V = (4\pi/3)k_D^3$$

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

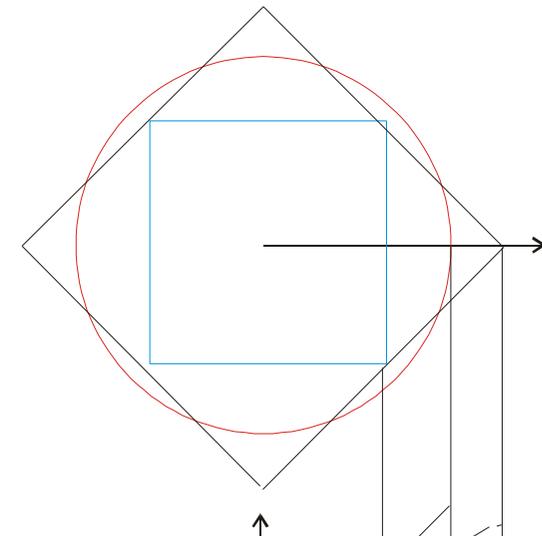
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Modelo de Debye

$$\Theta_D \equiv \hbar\omega_D/k_B \quad \omega_D = \kappa_D c$$

$$c_v = \frac{\partial}{\partial T} \frac{3\hbar c}{2\pi^2} \int_0^{\kappa_D} \frac{\kappa^3}{e^{\beta\hbar c\kappa} - 1} d\kappa = 9n\kappa_D \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3 \int_0^{\Theta_D/T} dx \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2}$$

$$c_v = 234nk_B \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3 \quad T \ll \Theta_D$$



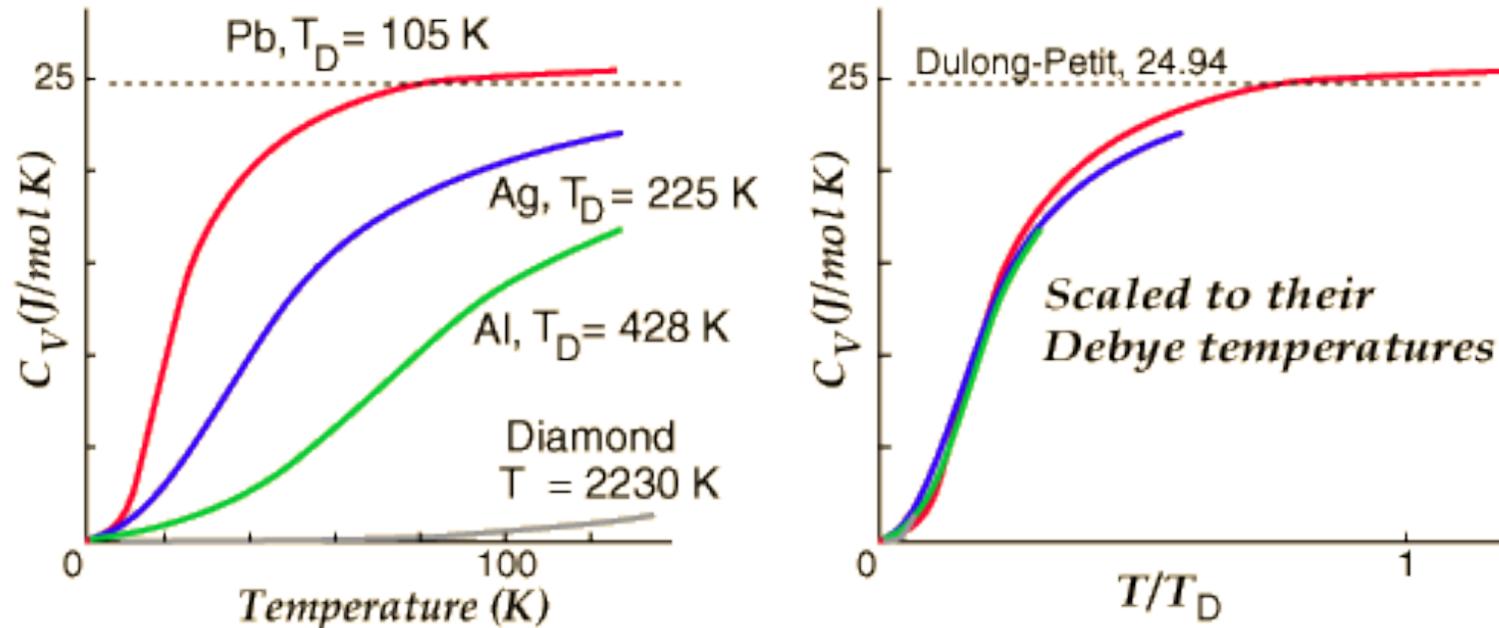
CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Cartagena99

Modelo de Debye

La temperatura de Debye separa la región de bajas T , donde se debe usar Mecánica Cuántica de la región de altas T donde rige la Mecánica Clásica.



Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Capacidad Calorífica a T intermedia

□ Los modelos de Einstein y Debye utilizan expresiones aproximadas para la relación de dispersión y así calcular el valor de la capacidad calorífica.

□ MODELO DE EINSTEIN

Einstein reemplaza todas las ramas óptias por una frecuencia constante ω_E . Este modelo se utiliza para describir fonones poco dispersivos como sucede con los fonones ópticos.

$$c_v = 3k_B \frac{N}{V} \left(\frac{x e^{x/2}}{e^x - 1} \right)^2 \quad x \equiv \beta \hbar \omega$$

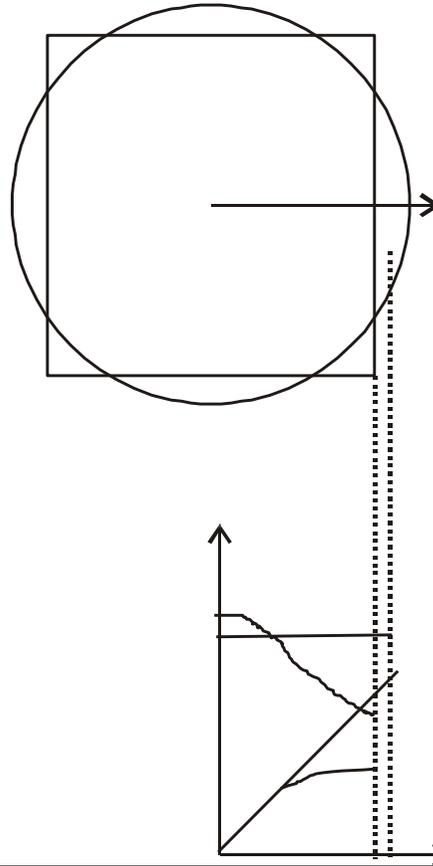
Sin embargo a temperaturas T bajas, este modelo predice un decrecimiento exponencial del calor específico que no se corresponde exáctamente con los

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Modelo de Einstein



CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Cartagena99

Efectos Anarmónicos

$$\frac{1}{e^x - 1} = \frac{1}{x} \left[1 - \frac{x}{2} + \frac{x^2}{12} + O(x^3) \right]$$

A alta T, no siempre c_v sigue la ley de Dulong-Petit. Además en las medidas de dispersión de fonones mediante técnicas de dispersión, los picos tienen una cierta anchura.

Los efectos anarmónicos nos permitirán explicar ciertas propiedades como la **dilatación térmica** y la **conductividad térmica**.



Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70



UNIVERSIDAD
COMPLUTENSE
MADRID

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70