

Puede usar: calculadora no programable; libro de fórmulas y tablas matemáticas (sin anotaciones ni añadidos). Cada pregunta se puntúa hasta 2,5 puntos. Es necesario aprobar cuestiones y problemas por separado. La evaluación del examen es global.

CUESTIONES. Conteste razonando, ajustándose a las preguntas y explicando lo que haga.

C1.- (a) Compare los órdenes de magnitud de la conductividad térmica y de la conductividad eléctrica de los sólidos.

(b) Justifique por qué el rango de variación de ambas magnitudes es tan distinto.

(c) ¿Cuál de las dos magnitudes presenta una mayor variabilidad?

C2.- (a) Sin hacer un desarrollo matemático, haga un esquema claro de las particularidades y propiedades generales del modelo de electrones fuertemente ligados.

(b) Se ha estudiado la relación de dispersión de la banda de conducción de un sólido con parámetro de red a . A lo largo de una dirección denominada ΓX del espacio recíproco resulta ser $\varepsilon(\mathbf{k}) = A + B |\sin(ka)|$. Calcule la masa efectiva de los electrones en las cercanías del mínimo de la banda a lo largo de dicha dirección y establezca una relación entre ella y la anchura de la banda $\varepsilon(\mathbf{k})$.

PROBLEMAS. No debe decir cómo se podrían resolver, ni poner la posible solución, sino **resolverlos realmente, explicar con claridad los pasos y discutir los resultados**. Defina **todas** las variables que use y **explique** aproximaciones, notación y fórmulas.

Obtenga una expresión algebraica y entonces estime numéricamente órdenes de magnitud.

P1.- Supongamos un metal divalente que cristaliza en una red cúbica simple de parámetro de red a .

(a) Dibuje la primera y la segunda zonas de Brillouin del cristal.

(b) Suponiendo válida la aproximación de **electrones libres** (esto es, que las bandas de energía son parabólicas), calcule la energía de Fermi del metal.

(c) Dibuje la esfera de Fermi y las zonas de Brillouin mencionadas, y discuta cuáles son los estados electrónicos ocupados, y en qué zona de Brillouin están.

(d) Si ahora suponemos que los electrones no son libres, sino que están descritos mediante una **aproximación de electrones cuasi-libres**, haga un bosquejo de cómo sería la superficie de Fermi del metal, así como las zonas del espacio recíproco que estarían ocupadas por los estados electrónicos.

P2.- En cristales iónicos, pero no en sólidos covalentes, cuando las vibraciones de la red son tales que iones de carga opuesta se mueven en sentidos contrarios (y eso es lo que ocurre justamente en las vibraciones ópticas de los cristales iónicos), se generan campos dipolares grandes. Por ese motivo, es de esperar la aparición de una fuerte absorción electromagnética cuando los fotones pueden excitar esas vibraciones en el cristal. Pero cuando la red absorbe la radiación óptica, por conservación de la cantidad de movimiento, se debe cumplir que el vector de onda $k_{\text{foton}} = k_{\text{fonon}}$.

(a) Estime el valor de los vectores de onda de los fonones ópticos excitados por la radiación electromagnética.

(b) Para poder dar estimaciones de las longitudes de onda para la que un cristal de NaCl presentaría un rápido aumento en la absorción de la radiación electromagnética por excitación de fonones ópticos, vamos a considerar vibraciones longitudinales a lo largo una cadena unidimensional con iones alternados de Cl y de Na. Supongamos que esas vibraciones las describimos mediante un modelo a primeros vecinos, con la misma constante de fuerza K entre los iones.

Llamando q al vector de onda de los modos de vibración, obtenga la expresión algebraica de la relación de dispersión $\omega(q)$.

(c) Estime la longitud de onda de la radiación electromagnética para la que el cristal de NaCl presenta un rápido aumento en la absorción de dicha radiación debido a la excitación de fonones ópticos por la misma.

Datos: Arista de la celda unidad del ClNa: 5,6 Å. Constante de fuerza o de muelle, $K = 14 \text{ N/m}$. Peso atómico del Na: 23; peso atómico del Cl: 35,5.

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