

Puede usar: calculadora no programable; libro de fórmulas y tablas matemáticas (sin anotaciones ni añadidos). Cada pregunta se puntúa hasta 2,5 puntos.

La evaluación del examen es global. **Es necesario aprobar cuestiones y problemas por separado.**

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

Cuestión 1.- Discuta cómo es la relación de dispersión $\omega^2(q)$ de los fonones de un sólido cristalino **tridimensional**, cuya estructura tiene una **base poliatómica**. Haga una representación gráfica de las relaciones de dispersión, 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.

Cuestión 2.-

(a) Haga una demostración del teorema de Bloch para un potencial periódico tridimensional.

(b) Explique las consecuencias físicas más importantes que se pueden extraer del teorema.

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.

Problema 1.- Se dispone de una red cuadrada **bidimensional** de parámetro de red a , en la que hay una base doble, con un átomo A en los vértices del cuadrado y otro B en el centro del cuadrado. Se trata por tanto de una red cuya base (o motivo) son dos átomos iguales.

(a) Las bandas de energía del sistema dentro de la aproximación de electrones fuertemente ligados se calculan suponiendo que las interacciones que juegan un papel importante en la estructura electrónica son las que se dan entre los átomos que son primeros y segundos vecinos en dicha red, pero a vecinos más lejanos se pueden considerar despreciables. Se sabe que la relación de dispersión de los electrones en dicha aproximación, hasta segundos vecinos, tiene la forma

$$E(\mathbf{k}) = \epsilon - t \sum_m e^{i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\rho}_m} + s \sum_n e^{i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\rho}_n},$$

donde las sumas en m hacen referencia a los vecinos más próximos y en n a los segundo vecinos más próximos. Explique con claridad los significados de las magnitudes ϵ , t , s .

(b) Evalúe la relación de dispersión $E(\mathbf{k})$, y describa cualitativamente las características que tiene.

Problema 2.- Se conoce que las estructuras cristalinas del NaCl y del KCl son iguales, y que las temperaturas de Debye de ambos cristales son $\Theta_D^{\text{NaCl}} = 281 \text{ K}$ y $\Theta_D^{\text{KCl}} = 230 \text{ K}$.

Sabiendo que, a una temperatura de 5 K, la capacidad calorífica de la red del NaCl es $1,6 \times 10^{-2} \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$, estime los valores de la capacidad calorífica del KCl a las temperaturas de 5 K y 3 K.

Datos: $h = 6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$, $m_p = 1,67 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$, $m_e = 9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$, $R_\infty = 109737 \text{ cm}^{-1}$, $e = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$, $N_A = 6,022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$, $k_B = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$, $1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$, $\mu_b = e\hbar/(2m_e) = 9,27 \cdot 10^{-24} \text{ J T}^{-1}$, $c = 3 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}$, $a_o = 4\pi\epsilon_o\hbar^2/me^2 \simeq 0,52 \text{ Å}$, $1/(4\pi\epsilon_o) = 9 \cdot 10^9 \text{ m}^3 \text{ kg s}^{-2} \text{ C}^{-2}$, $\lambda_C = h/(m_e c) = 0,024 \text{ Å}$.