

Guía 7: Fonones Cap. 4-5 Kittel; Cap. 22-23 A-M.

Lu. 19 Mayo 2014

Tarea: 5, 7, y 8, para el Lu. 26 Mayo.

1. **Red monoatómica lineal.** Dada la relación de dispersión para una red monoatómica lineal, con una constante de fuerza κ y el parámetro de red es a ,

$$\omega(q) = \frac{4\kappa}{M} \operatorname{sen} \frac{qa}{2},$$

encuentre los valores de q para los cuales no hay propagación de ondas.

2. **Cadena diatómica.** Considere una cadena armónica lineal formada por dos átomos por celda unidad, de masas M_1 y M_2 . La interacción es a primeros vecinos, con una constante de fuerza κ y el parámetro de red es a .

a) Muestre que la relación de dispersión viene dada por

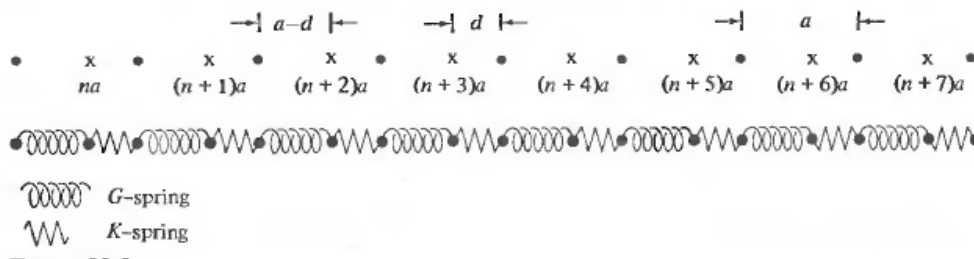
$$\omega^2(q) = \kappa \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \pm \kappa \left[\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)^2 - \frac{4 \operatorname{sen}^2 \left(\frac{qa}{2} \right)}{M_1 M_2} \right]^{\frac{1}{2}}.$$

b) Calcule la velocidad del sonido

c) Muestre que para el caso $M_1 = M_2$, el resultado es equivalente al de la curva de dispersión para una cadena monoatómica.

d) Considere los valores $\kappa = 5 \times 10^3$ dinas/cm y masas de $M_1 = 5,9 \times 10^{-23}$ g y $M_2 = 3,8 \times 10^{-23}$ g, y calcule los valores posibles de las frecuencias en el límite de la primera zona de Brillouin. ¿Cuáles son los valores de las frecuencias prohibidas?

3. Considere una cadena lineal diatómica, cuyos átomos son idénticos pero están conectados por resortes de constantes diferentes, K y G , que se van alternando. La interacción sólo se considera a primeros vecinos. Además, considere $d \leq a/2$ y que $K \geq G$. (ver figura).



- a) Escriba la energía potencial del sistema, y a partir de allí escriba la ecuación de movimiento para los átomos de una celda unidad del sistema.

- b) Suponga soluciones ondulatoria de tipo exponencial $\exp i(kna - \omega t)$ y muestre que la relación de dispersión es

$$\omega^2 = \frac{K + G}{M} \pm \frac{1}{M} \sqrt{K^2 + G^2 + 2KG \cos ka}$$

- c) Haga un dibujo de la relación de dispersión y de nombre a las diferentes ramas.

4. **Energía de punto cero.** Calcule la energía de punto cero de un cristal a partir del modelo de Debye. Estime ese valor para el caso del He sólido (¿a que temperatura y presión se puede tener helio sólido?), suponiendo una temperatura de Debye del orden de 24 K. (R: $E_0 = 9/8k_B T_D N$; para el He, por átomo, da $\approx 0,24 \times 10^{-2}$ eV.)
5. * **Número de fonones.** Calcule el número de fonones en la aproximación de Debye. Discuta el caso límite para altas y bajas temperaturas, i.e. $k_B T \gg \hbar c_s k_D$ y $k_B T \ll \hbar c_s k_D$, donde k_D es el número de onda de Debye y c_s es la velocidad del sonido, y $s = 1, 2, 3$ corresponde a los tres modos de fonones. El número total de átomos en el cristal es N_a .
(R: Baja T : $N \propto (1/c_1^3 + 1/c_2^3 + 1/c_3^3)(k_B/\hbar k_D)^3 T^3$; alta T : $N \propto (1/c_1 + 1/c_2 + 1/c_3)(k_B/\hbar k_D) T$)
6. **Calor específico a alta y baja temperatura.** Determine la dependencia del calor específico C_v para el caso temperaturas altas y bajas, o sea $k_B T \gg \hbar c_s k_D$ y $k_B T \ll \hbar c_s k_D$. (R: alta T : $C_v = 3Nk_B$; baja T : $C_v = (12\pi^4/5)Nk_B(T/T_D)^3$.)
7. * **Temperatura de Debye del Ge.** El germanio cristalizado tiene, a bajas temperaturas, las capacidades calóricas que se muestran en la Tabla de la pág. 3. Utilizando esos datos, estima la temperatura de Debye T_D a 0 K del Ge. El volumen del átomo-gramo a 0 K puede tomarse como $13,606 \text{ cm}^3$.
8. * **Grafeno y el calor específico en d dimensiones, con relación dispersión no-lineal.**
- a) Muestre que la dependencia del calor específico con la temperatura, a bajas temperaturas, para un cristal bidimensional y relación de dispersión lineal (aproximación de Debye), es de la forma $C_v \propto T^2$.
- b) Suponga que cierto material tiene una relación de dispersión $w(q)$ no lineal para q pequeño, es decir $w(q) \propto q^n$, para $q \ll 1$. Muestre que a baja T el calor específico es de la forma $C_v \propto T^{d/n}$, donde d es la dimensión espacial de material.
- c) Considere ahora el grafeno, el material bidimensional por excelencia, sintetizado hace solo unos años atrás y que fue premiado con el Nobel el año 2010. Aquí, como se puede ver de la figura 1b), hay tres modos acústicos, que corresponde a dos modos en el plano, longitudinal (LA) y transversal (TA), así como un modo flexural fuera del plano (ZA). En ellos, para $q \ll 1$, la relación de dispersión para los modos LA y TA es lineal, mientras que para el modo ZA la relación de dispersión es cuadrática.
A partir de esta información, explique claramente los resultados experimentales mostrados en la figura 2, en particular el cuadro a baja T . (tomado de *Thermal properties of graphene: Fundamentals and applications*, Eric Pop, Vikas Varshney, and Ajit K. Roy, MRS Bulletin **37**, p. 1273, Dec. 2012).

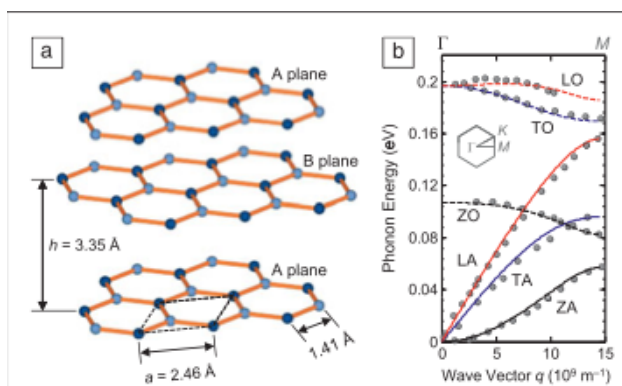


Figure 1. (a) Schematic of the atomic arrangement in graphene sheets. Dashed lines in the bottom sheet represent the outline of the unit cell. The areal density of carbon atoms in graphene is $3.82 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$. (b) Graphene phonon dispersion along the Γ -to- M crystallographic direction.⁴⁻⁷ Lines show numerical calculations; symbols represent experimental data. Note the presence of linear in-plane acoustic modes (longitudinal acoustic, LA; transverse acoustic, TA), as well as flexural out-of-plane acoustic (ZA) modes with a quadratic dispersion. The latter are responsible for many of the unusual thermal properties of graphene. Graphene has a much higher sound velocity and optical phonon (OP) energy than most materials; by comparison, OPs have energies of $\sim 0.035 \text{ eV}$ in germanium and GaAs and $\sim 0.06 \text{ eV}$ in silicon. LO, longitudinal optical; TO, transverse optical; ZO, out-of-plane optical.

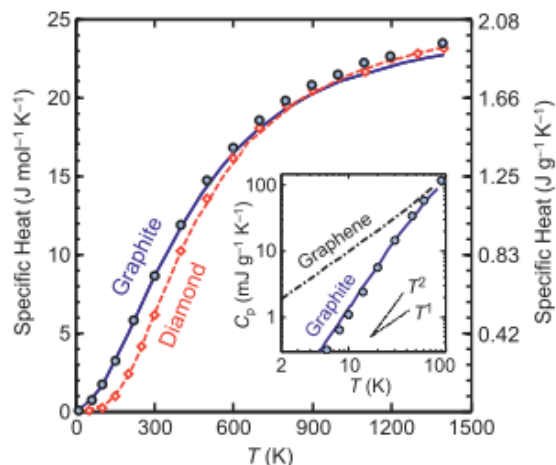


Figure 2. Specific heats of graphene, graphite, and diamond, all dominated by phonons at temperatures above $\sim 1 \text{ K}$. Lines show numerical calculations;^{10,17,21} symbols represent experimental data.^{19,22,23} The inset indicates that the low-temperature specific heat of an isolated graphene sheet is expected to be higher than that of graphite because of the contribution of low-frequency ZA phonons (also see Figure 1b). Above $\sim 100 \text{ K}$, the specific heats of graphene and graphite should be identical. The inset makes use of different units to illustrate a common occurrence in practice (e.g., $\text{J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$, or $\text{J g}^{-1} \text{ K}^{-1}$, or $\text{J cm}^{-3} \text{ K}^{-1}$), but conversion is easily achieved by dividing and/or multiplying by the atomic mass of carbon ($A = 12.01 \text{ g/mol}$) or the density of graphite ($\rho \approx 2.25 \text{ g/cm}^3$).

$T, ^\circ\text{K}$	$C_p, \text{ cal g-atom}^{-1} \text{ deg}^{-1}$	$T, ^\circ\text{K}$	$C_p, \text{ cal g-atom}^{-1} \text{ deg}^{-1}$
2.461	0.0001283	7.131	0.003845
2.675	0.0001766	7.510	0.004668
2.971	0.0002337	7.974	0.005757
3.175	0.0003008	8.465	0.007220
3.481	0.0003918	8.948	0.008950
3.713	0.0004876	9.434	0.01104
3.961	0.0005763	10.006	0.01391
4.364	0.0007935	10.442	0.01679
4.471	0.0008362	11.015	0.02103
4.814	0.001077	11.458	0.02479
4.963	0.001170	12.011	0.03039
5.283	0.001446	12.471	0.03559
5.503	0.001636	12.902	0.04187
5.774	0.001915	13.478	0.04946
6.024	0.002188	14.002	0.05829
6.284	0.002513	14.536	0.06767
6.506	0.002802	15.002	0.07647
6.784	0.003247		