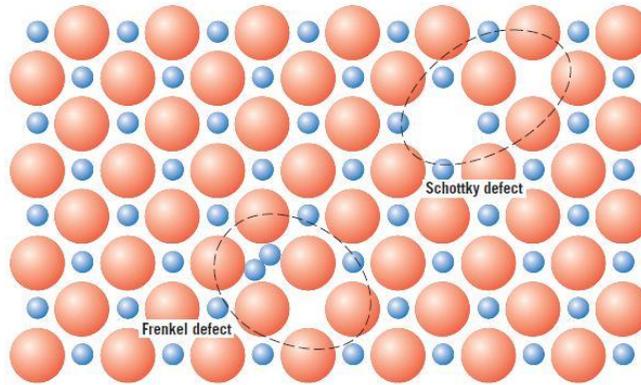


Nos interesan dos tipos de defectos presentes en los cristales y que contribuyen a su termodinámica. Sus mecanismos de creación se muestran a continuación:



### 1. Defecto de Schottky

Estos defectos corresponden a huecos atómicos en la red cristalina. Los átomos abandonan sus posiciones en los nodos de la red y migran hacia la superficie. Localmente, la ausencia de un átomo reduce la cohesión del cristal, de modo que la creación de un hueco costará una energía  $\varepsilon_S > 0$ , que equivale aproximadamente a la energía necesaria para extraer un átomo del cristal. A continuación, despreciaremos los efectos de superficie y consideraremos que las excitaciones térmicas crean  $n$  huecos entre  $N$  sitios, con  $N$  fijo.

1. Describe un microestado del sistema y escribe su energía  $E$ .
2. ¿Cuál es el número  $W_S$  de microestados de energía constante?
3. Obtener la entropía  $S$  del sistema en el límite  $n \gg 1$ .
4. Definir la temperatura microcanónica  $T$ . Deducir que la densidad  $d$  de vacantes es

$$d = \frac{n}{N} = \frac{1}{e^{\varepsilon_S/k_B T} + 1}$$

Simplifique esta relación en el límite de baja densidad  $n \ll N$ .

5. Expresar la energía en función de la temperatura. Definir la capacidad calorífica  $C_V(T)$  asociada a las vacantes. Demostrar que toma la forma

$$C_V(T) = Nk_B \frac{(\Theta_S/2T)^2}{\text{ch}^2(\Theta_S/2T)}$$

Escribir  $\Theta_S$  en función de  $\varepsilon_S$ , y dar el comportamiento a baja temperatura  $T \ll \Theta_S$ .

6. Sabiendo que  $\varepsilon_S \simeq 1\text{eV}$ . Obtener la temperatura  $\Theta_S$ . ¿Cuál cree que es la validez del resultado anterior? En particular, ¿qué puede ocurrirle al cristal?

## 2. Defecto de Frenkel

Ahora nos ocupamos de los defectos de Frenkel. Dentro de la red cristalina, hay sitios intersticiales en los que los átomos pueden alojarse, aunque esto es menos favorable energéticamente. Observaremos que  $N_i$  es el número de sitios intersticiales accesibles. Un defecto de Frenkel corresponde a la transferencia de un átomo de uno de los  $N$  sitios de la red a uno de los  $N_i$  sitios intersticiales. Cuesta una energía elemental  $\varepsilon_F > 0$  por defecto. Anotaremos  $n$  el número de defectos creados y supondremos que  $N$  y  $N_i$  son fijos y del mismo orden de magnitud.

7. Describe un microestado y expresa su energía.
8. ¿Cuál es el número  $W_F$  de microestados de energía constante?
9. Demostrar que la entropía toma la siguiente forma en el límite  $n \gg 1$  :

$$S \simeq k_B [N \ln N + N_i \ln N_i - 2n \ln n - (N - n) \ln(N - n) - (N_i - n) \ln(N_i - n)]$$

10. Derivar la temperatura  $T$  en función de los datos y  $n$ .
11. Demostrar entonces que en el límite de baja densidad  $n \ll N$ , la densidad de defectos sigue la ley

$$d \simeq \sqrt{d_i} e^{-\Theta_F/T}$$

donde daremos las expresiones para  $d_i$  y  $\Theta_F$  en función de los datos.