Física del estado sólido

Prof. Carlos Lamas
JTP Alejo Costa

Práctica 2: Fonones

Año 2022

1. **Cadena monoatómica**

   Considere una cadena unidimensional monoatómica con separación interactómica a donde los átomos interactúan por medio de un potencial semejante al de un oscilador armónico. Si cada átomo tiene masa m y la constante elástica del potencial de oscilador es $\boldsymbol{k}$

   a) Demuestre que la relación de dispersión es:

   $$\omega(q) = 2\sqrt{\frac{k}{m}}\,|\sin(qa/2)|$$

   Grafique $\omega(q)$. Analice la dependencia de $\omega(q)$ para $qa \ll 1$ ¿Cuál es la velocidad del sonido?

   b) Encuentre la velocidad de fase y de grupo como función de k.

   c) Obtenga la densidad de estados $g(\omega)$

   d) Encuentre una expresión para el calor específico tomando que cada fonón tiene energía $E_n = \hbar\omega(n+1/2)$, esta expresión estará en términos de una integral que no se puede resolver analíticamente. Haga una expansión del calor específico para altas temperaturas.

2. **Cadena diatómica general**

   Considere una cadena unidimensional formada por dos tipos de átomos de masas m_1 y m_2. La interacción entre átomos es la de un oscilador armónico con constantes elásticas κ_1 y κ_2 como muestra la figurra.

   a) Defina la celda unidad de repetición y calcule $\omega(q)$.

   b) Grafique $\omega(q)$ ¿A qué se denomina modos acústicos y modos ópticos?, ¿Los fonones tienen todos los modos de vibración permitidos?

   c) Encuentre la velocidad del sonido.

   d) ¿Para qué valores de q se produce el valor máximo y mínimo de los modos acústico y óptico? Analice los casos límites en donde las masas y las constantes elásticas son iguales y compare con la cadena monoatómica.

   e) Analice el cociente de las amplitudes de vibración para $q = 0$. ¿Cuál es su dependencia con las masas atómicas?

   f) Hacer un esquema de los desplazamientos atómicos de los modos acústico y óptico para $q \simeq 0$.

   g) Para el caso $m_1 = m_2$ considere que la cadena se ve sujeta, en un principio, a una fuerza externa que genera un movimiento con frecuencia ω_0 tal que ω_0 no es un valor permitido dentro de los valores de $\omega(q)$ que encontró en el inciso *a*). Esto genera ondas evanescentes con momento k complejo. Encuentre la longitud característica de estas ondas evanescentes. Haga lo mismo para el caso $\kappa_1 = \kappa_2$ con $m_1 \neq m_2$ y $\kappa_1 = \kappa_2$ con $m_1 = m_2$.

3. **Cadena monoatómica con una impureza**

   Considere una cadena unidimensional en donde todos los átomos tienen masa m e interactúan con constante elástica κ excepto el átomo en la posición $n = 0$ que tiene masa M. Utilice un ansatz de la forma $\delta x_n = e^{i\omega t - q|n|a}$ con q complejo y encuentre las frecuencias $\omega(q)$.

4. *** Red cuadrada monoatómica ***

   Considere una red cuadrada de lado a formada por átomos de masa M. Cada átomo interactúa con sus primeros vecinos con un potencial de oscilador armónico de constante elástica k_1, y con sus segundos vecinos con un potencial con constante elástica k_2.

Si los vectores base de la red son $\boldsymbol{a}_1 = a\hat{x}$ y $\boldsymbol{a}_2 = a\hat{y}$, la posición de cualquier átomo en la red puede ser descrita como $\boldsymbol{r}_{nm} = n\boldsymbol{a}_1 + m\boldsymbol{a}_2$. Entonces, el átomo en la posición $\boldsymbol{r}_{nm}$ tendrá 4 primeros vecinos en las posiciones $\boldsymbol{r}_{n,m} + \boldsymbol{n}_i$ con

$$\boldsymbol{n}_1 = a\hat{x}, \qquad \boldsymbol{n}_2 = a\hat{y}, \qquad \boldsymbol{n}_3 = -a\hat{x}, \qquad \boldsymbol{n}_4 = -a\hat{y};$$

mientras que sus segundos vecinos estarán en las posiciones $\boldsymbol{r}_{n,m} + \boldsymbol{p}_j$ con

$$\boldsymbol{p}_1 = a\hat{x} + a\hat{y}, \qquad \boldsymbol{p}_2 = -a\hat{x} + a\hat{y} \qquad \boldsymbol{p}_3 = -a\hat{x} - a\hat{y}, \qquad \boldsymbol{p}_4 = a\hat{x} - a\hat{y}.$$

a) A partir de la ecuación de movimiento

$$M\frac{\partial^2}{\partial t^2}u(\boldsymbol{r}_{nm}, t) = k_1 \sum_{j=1}^{4} \left[u(\boldsymbol{r}_{nm} + \boldsymbol{n}_j) \cdot \boldsymbol{n}_j\right] \boldsymbol{n}_j + k_2 \sum_{j=1}^{4} \left[u(\boldsymbol{r}_{nm} + \boldsymbol{p}_j) \cdot \boldsymbol{p}_j\right] \boldsymbol{p}_j$$

propniendo como solución general una onda de la forma

$$u(\boldsymbol{r}_{nm}, t) = \begin{pmatrix} u_x(\boldsymbol{q}) \\ u_y(\boldsymbol{q}) \end{pmatrix} e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}_{nm}} e^{-i\omega t}$$

demuestre que se cumple

$$D(\boldsymbol{q}) \begin{pmatrix} u_x(\boldsymbol{q}) \\ u_y(\boldsymbol{q}) \end{pmatrix} = \omega^2 \begin{pmatrix} M & 0 \\ 0 & M \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_x(\boldsymbol{q}) \\ u_y(\boldsymbol{q}) \end{pmatrix}$$

donde $D(\boldsymbol{q})$ es la llamada **matriz dinámica**

$$D(\boldsymbol{q}) = \begin{pmatrix} 4k_1 \sin^2(q_x a/2) + 2k_2\left[1 - \cos(q_x a)\cos(q_y a)\right] & 2k_2 \sin(q_x a)\sin(q_y a) \\ 2k_2 \sin(q_x a)\sin(q_y a) & 4k_1 \sin^2(q_x a/2) + 2k_2\left[1 - \cos(q_x a)\cos(q_y a)\right] \end{pmatrix}$$

b) Para obtener la relación de dispersión $\omega(\boldsymbol{q})$ necesitamos que la ecuación $\left[D(\boldsymbol{q}) - \omega^2 M\mathcal{I}\right] u(\boldsymbol{q}) = 0$ tenga soluciones no triviales, por lo que pedimos

$$\det(D(\boldsymbol{q}) - \omega^2 M\mathcal{I}) = 0$$

de donde se obtienen dos fonones acústicos, longitudinales (LA) y transversales (TA), demostrar que para el camino $\Gamma - X$ y $q_x \simeq 0$ se tiene:

$$\omega_{LA} = \sqrt{\frac{k_1 + k_2}{M}} q_x a, \qquad \omega_{TA} = \sqrt{\frac{k_2}{M}} q_x a$$

mientras que para el camino $\Gamma - M$ con $q_x = q_y = q \simeq 0$ se obtiene

$$\omega_{LA} = \sqrt{\frac{k_1 + 4k_2}{M}} qa, \qquad \omega_{TA} = \sqrt{\frac{k_1}{M}} qa$$

donde Γ, X y M son puntos de simetría de la primera zona de Brillouin en el espacio recíproco

$$\Gamma : \boldsymbol{q} = (0, 0), \qquad X : \boldsymbol{q} = (q, 0) \qquad M : \boldsymbol{q} = (2\pi/a, 2\pi/a).$$

c) Graficar $\omega(\boldsymbol{q})$ para el camino $\Gamma - X - M - \Gamma$, suponer que $k_1 = 200\ N/m$, $k_2 = 100\ N/m$ y $M = 2 \cdot 10^{-26}$ kg. Si bien este es un modelo simplificado, puede describir los fonones de sistemas tales como el Ne, Ar, y Kr. Comparar con los resultados teóricos y experimentales de Phys. Rev. B 75 (2007) 024101.

d) Grafique (con algún programa o lenguaje de programación) la relación de dispersión $\omega(q)$ para $q_x, q_y \in [-\pi, \pi]$

5. **Los modos normales se vuelven autoestados**

Considere un conjunto de N partículas con masas m_α que interactúan mediante un potencial $U = \frac{1}{2}\sum_{\alpha,\beta} x_\alpha V_{\alpha\beta} x_\beta$ donde x_α es la desviación de la partícula α de su posición de equilibrio y tomamos V como una matriz simétrica.

a) Definiendo $y_\alpha = \sqrt{m_\alpha} x_\alpha$ encuentre las ecuaciones de movimiento para las y_α. Muestre entonces que las soluciones son de la forma

$$y_\alpha^m = e^{-i\omega_m t} s_\alpha^m$$

siendo $-\omega_m^2$ un autovalor de la matriz $S_{\alpha\beta} = \frac{1}{\sqrt{m_\alpha}} V_{\alpha\beta} \frac{1}{\sqrt{m_\beta}}$ y s^m su autovector.

b) Como S es simétrica y real podemos tomar sus autovectores como reales y ortogonales. Construya las coordenadas generalizadas

$$Y^m = \sum_\alpha s_\alpha^m y_\alpha \qquad\qquad P^m = \sum_\alpha s_\alpha^m \frac{p_\alpha}{\sqrt{m_\alpha}}$$

y muestre que sus correspondientes operadores cumplen las reglas de conmutación canónicas.

c) Escriba el hamiltoniano en términos de estas nuevas coordenadas generalizadas.