

Estructura de la Materia 2
Primer Cuatrimestre - 2020
Guía 3 - Parte 2

Problema 1: Red unidimensional con base

Considere una red unidimensional formada por átomos de tipo A y tipo B con masas M_A y M_B , respectivamente (ver Figura 1). Cada átomo presenta interacciones a primeros vecinos, con constante de fuerza C_1 , y a segundos vecinos con constante de fuerza C_2 . La distancia a primeros vecinos es a .

- ¿Cuántas ramas acústicas y ópticas espera encontrar? Justifique.
- Calcule la matriz dinámica y la relación de dispersión del sistema.
- Analice los modos normales en el centro y en el borde de la primera zona de Brillouin.
- Encuentre la densidad de estados de fonones cuando $C_2 = 0$.

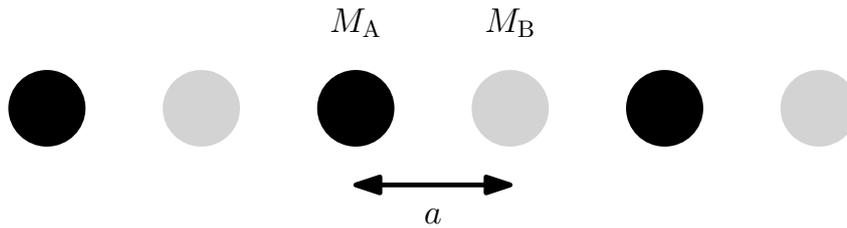


Figura 1: Red unidimensional del ejemplo 1

Resolución

a) El primer paso en la resolución del problema es determinar la celda unidad del sistema. Para ello, primero dibujamos todas las interacciones sobre los átomos A y B, como se muestra en la Figura 2. Desde el punto de vista de las interacciones cada átomo ve lo mismo, primeros vecinos con constante de acoplamiento C_1 y segundos vecinos con C_2 . Sin embargo, como los átomos son diferentes, la celda unidad contiene un átomo tipo A y otro tipo B y la red se escribe como una red de Bravais con vector primitivo $\mathbf{a}_1 = 2a\hat{\mathbf{x}}$ y base atómica $\{\mathbf{d}_A = 0, \mathbf{d}_B = a\hat{\mathbf{x}}\}^1$, donde hemos elegido el versor $\hat{\mathbf{x}}$ con la dirección de la red y sentido positivo hacia la derecha. Recordemos que un sistema de dimensión d con N celdas y P átomos por celda, tenemos dNP modos

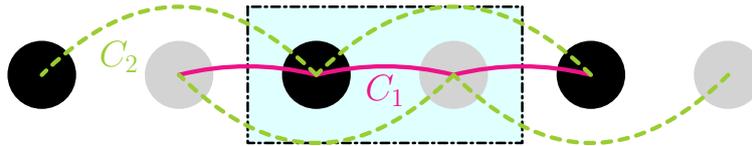


Figura 2: Celda unidad e interacciones

normales. Como cada rama tiene N valores posibles de \mathbf{k} , existen dP ramas en el sistema, de las cuales d son ramas acústicas y $d(P - 1)$ ramas ópticas. El sistema a estudiar es unidimensional $d = 1$ y tiene dos átomos por celda, por lo tanto tendrá una rama óptica y una rama acústica. Este resultado también nos indica que la matriz dinámica D tiene que ser $\dim(D) = 2 \times 2$.

b) Los elementos de la matriz dinámica $D_{\alpha,\gamma}^{i,l}$ se escriben

$$D_{\alpha,\gamma}^{i,l}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{M_\alpha M_\gamma}} \left[\delta_{\alpha,\gamma} \sum_{q,\sigma} \phi_{0,q,\alpha,\sigma}^{i,l} - \sum_m e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_m} \phi_{m,0,\alpha,\gamma}^{i,l} \right], \quad (1)$$

donde i, l representan las coordenadas cartesianas, α, γ, σ son los elementos de la base, m, q los índices de las celdas o puntos en la red de Bravais, \mathbf{R}_m el vector de la RB en la celda m , \mathbf{k} un vector de onda, y $\phi_{m,n,\alpha,\beta}^{i,l}$ los coeficientes que describen las interacciones. Estos coeficientes dependen de las constantes de fuerza C :

$$\phi_{m,n,\alpha,\beta}^{i,l} = C_{m,n,\alpha,\beta} \left(\hat{\mathbf{i}} \cdot \hat{\mathbf{R}}_{m,n,\alpha,\beta} \right) \left(\hat{\mathbf{i}} \cdot \hat{\mathbf{R}}_{m,n,\alpha,\beta} \right), \quad (2)$$

¹Si los átomos fuesen indistinguibles, la red es una red de Bravais, con $\mathbf{a}_1 = a\hat{\mathbf{x}}$

con $\hat{\mathbf{i}}, \hat{\mathbf{l}} = \{\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}}, \hat{\mathbf{z}}\}$ y $\hat{\mathbf{R}}_{m,n,\alpha,\beta}$ el versor que apunta en la dirección que une al átomo en la posición m, α con el átomo en n, β con sentido hacia m, α . Como la red es 1D, $\hat{\mathbf{i}} = \hat{\mathbf{l}} = \hat{\mathbf{x}}$ y $\hat{\mathbf{R}}_{m,n,\alpha,\beta} = \pm \hat{\mathbf{x}}$, por lo tanto:

$$\phi_{m,n,\alpha,\beta}^{i,l} = C_{m,n,\alpha,\beta} (\hat{\mathbf{x}} \cdot (\pm \hat{\mathbf{x}})) (\hat{\mathbf{x}} \cdot (\pm \hat{\mathbf{x}})) = C_{m,n,\alpha,\beta} (\pm 1)^2 = C_{m,n,\alpha,\beta}, \quad (3)$$

y la matriz dinámica queda escrita en términos de las constantes de fuerza:

$$D_{\alpha,\gamma}^{x,x}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{M_\alpha M_\gamma}} \left[\delta_{\alpha,\gamma} \sum_{q,\sigma} C_{0,q,\alpha,\sigma} - \sum_m e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_m} C_{m,0,\alpha,\gamma} \right] \quad (4)$$

A continuación, escribimos los elementos de la matriz dinámicas. Los índices de los elementos de la base $\alpha, \gamma, \sigma = A, B$ y numeramos los puntos de la RB m, q con números enteros no negativos como se muestra en la Figura 3. Como las interacciones son a primeros o segundos vecinos, los átomos en la celda 0 solo pueden interactuar con

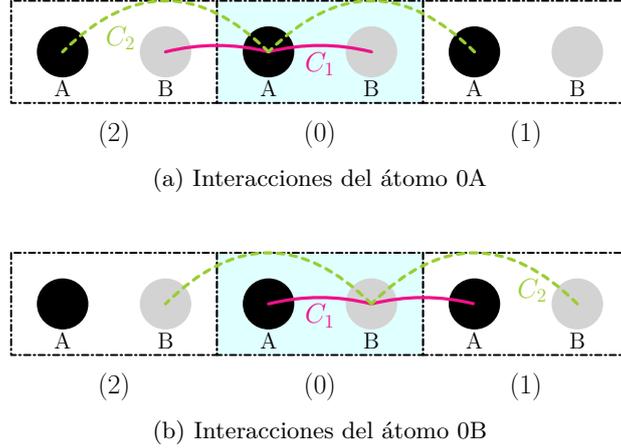


Figura 3: Interacciones de los átomos de la base atómica.

los átomos de 0, 1 ó 2, por lo tanto $C_{0,q,\alpha,\gamma} = 0 = C_{q,0,\alpha,\gamma}$ si $q \neq 0, 1, 2 \forall \alpha, \gamma$. De la Figura 3(a), obtenemos los coeficientes $C_{0,q,\alpha,\gamma}$

$$C_{0,0,A,B} = C_1 \quad C_{0,2,A,B} = C_1 \quad C_{0,1,A,A} = C_2 \quad C_{0,2,A,A} = C_2. \quad (5)$$

Para 0B

$$C_{0,0,B,A} = C_1 \quad C_{0,1,B,A} = C_1 \quad C_{0,1,B,B} = C_2 \quad C_{0,2,B,B} = C_2, \quad (6)$$

y por simetría $C_{0,q,\alpha,\gamma} = C_{q,0,\gamma,\alpha}$. Con estos coeficientes, escribimos la matriz dinámica. El elemento $D_{A,A}^{x,x}$,

$$\begin{aligned} D_{A,A}^{x,x}(\mathbf{k}) &= \frac{1}{M_A} \left[\delta_{A,A} \sum_{q,\sigma} C_{0,q,A,\sigma} - \sum_m e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_m} C_{m,0,A,A} \right] \\ &= \frac{1}{M_A} [C_{0,0,A,B} + C_{0,1,A,A} + C_{0,2,A,A} + C_{0,2,A,B} - e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_1} C_{1,0,A,A} - e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_2} C_{2,0,A,A}] \\ &= \frac{1}{M_A} [C_1 + C_2 + C_2 + C_1 - e^{i\mathbf{k} \cdot (2a\hat{\mathbf{x}})} C_2 - e^{i\mathbf{k} \cdot (-2a\hat{\mathbf{x}})} C_2] = \frac{1}{M_A} [2C_1 + 2C_2(1 - \cos(2ka))] \quad (7) \end{aligned}$$

donde en el último paso usamos los resultados de la Ec. (5), Ec. (6) y las posiciones de las celdas 1 y 2 en la RB. Para el otro elemento de la diagonal,

$$\begin{aligned} D_{B,B}^{x,x}(\mathbf{k}) &= \frac{1}{M_B} \left[\delta_{B,B} \sum_{q,\sigma} C_{0,q,B,\sigma} - \sum_m e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_m} C_{m,0,B,B} \right] \\ &= \frac{1}{M_B} [C_{0,0,B,A} + C_{0,1,B,A} + C_{0,1,B,B} + C_{0,2,B,B} - e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_1} C_{1,0,B,B} - e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_2} C_{2,0,B,B}] \\ &= \frac{1}{M_B} [C_1 + C_1 + C_2 + C_2 - e^{i\mathbf{k} \cdot (2a\hat{\mathbf{x}})} C_2 - e^{i\mathbf{k} \cdot (-2a\hat{\mathbf{x}})} C_2] = \frac{1}{M_B} [2C_1 + 2C_2(1 - \cos(2ka))] \quad (8) \end{aligned}$$

Por último,

$$D_{A,B}^{x,x}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{M_A M_B}} \left[- \sum_m e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_m} C_{m,0,A,B} \right] = \frac{-1}{\sqrt{M_A M_B}} [e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_0} C_{0,0,A,B} + e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_1} C_{1,0,A,B}]$$

$$= \frac{-C_1}{\sqrt{M_A M_B}} [1 + e^{i2ka}] \quad (9)$$

$$D_{B,A}^{x,x}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{M_A M_B}} \left[-\sum_m e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_m} C_{m,0,B,A} \right] = \frac{-1}{\sqrt{M_A M_B}} [e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_0} C_{0,0,B,A} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_2} C_{2,0,B,A}]$$

$$= \frac{-C_1}{\sqrt{m_a m_b}} [1 + e^{-i2ka}] = (D_{A,B}^{x,x}(\mathbf{k}))^* \quad (10)$$

Entonces:

$$D^{xx}(k) = \begin{pmatrix} \frac{2}{M_A} [C_1 + C_2(1 - \cos(2ka))] & \frac{-C_1}{\sqrt{M_A M_B}} [1 + e^{i2ka}] \\ \frac{-C_1}{\sqrt{M_A M_B}} [1 + e^{-i2ka}] & \frac{2}{M_B} [C_1 + C_2(1 - \cos(2ka))] \end{pmatrix} \quad (11)$$

y la relación de dispersión es:

$$\omega_{\pm}^2(k) = \frac{C_1}{\mu} f(k) \left[1 \pm \sqrt{1 - \frac{2\mu^2}{M_A M_B} \left(2 - \frac{1 + \cos 2ka}{f(k)^2} \right)} \right] \quad f(k) = 1 + 2\frac{C_2}{C_1} \sin^2(ka) \quad (12)$$

y μ representa la masa reducida $\mu = \frac{M_A + M_B}{M_A M_B}$. La solución ω_- es la rama acústica y ω_+ la rama óptica, como se muestra en la Figura 4

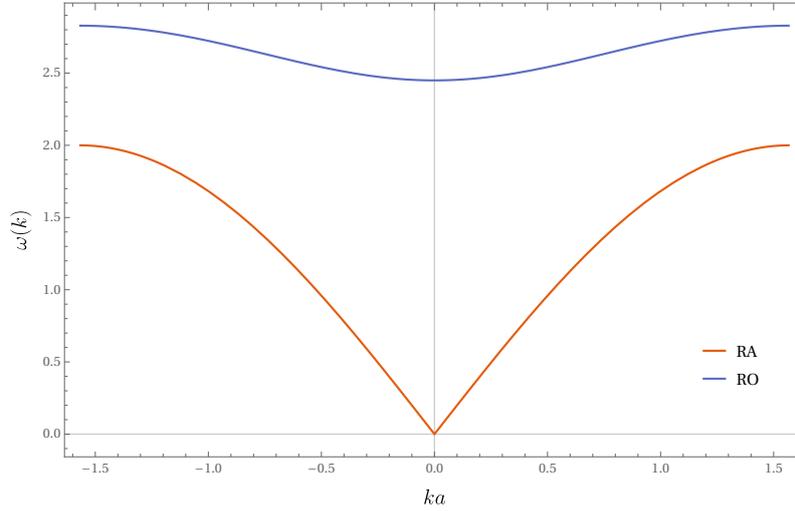


Figura 4: Relación de dispersión con $C_1 = 2C_2$ y $M_A = 2M_B$.

c) Recordemos que las soluciones son de la forma:

$$u_{p,\gamma} = \epsilon_\gamma e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_p - \omega t)} \quad (13)$$

donde p indica el punto en la RB y γ el átomo de la base. En el centro de la primera zona de Brillouin ($k = 0$), las celdas están en fase:

$$u_{p,\gamma}(k = 0) = \epsilon_\gamma e^{-i\omega t} \quad (14)$$

y las frecuencias de los modos son:

$$\omega_{RA}(k = 0) = \omega_-(k = 0) = 0 \quad \omega_{RO}(k = 0) = \omega_+(k = 0) = \sqrt{2C_1/\mu} \quad (15)$$

Encontrar las amplitudes $\tilde{\epsilon}_\gamma = \sqrt{M_\gamma} \epsilon_\gamma$ implica resolver las ecuaciones de autovectores:

$$(D^{xx}(k = 0) - \omega^2(k = 0)\mathbb{I})\tilde{\epsilon} \Rightarrow \begin{pmatrix} \tilde{\epsilon}_A^{RA} \\ \tilde{\epsilon}_B^{RA} \end{pmatrix} = \sqrt{\frac{M_A}{M_B}} \quad \wedge \quad \begin{pmatrix} \tilde{\epsilon}_A^{RO} \\ \tilde{\epsilon}_B^{RO} \end{pmatrix} = -\sqrt{\frac{M_B}{M_A}} \quad (16)$$

Mientras que para el borde de zona $k = \pi/2a$

$$\omega_{RA}(k = \pi/2a) = \sqrt{\frac{2C_1 + 4C_2}{M_A}} \quad \tilde{\epsilon}_A^{RA} = 1 \quad \tilde{\epsilon}_B^{RA} = 0 \quad (17)$$

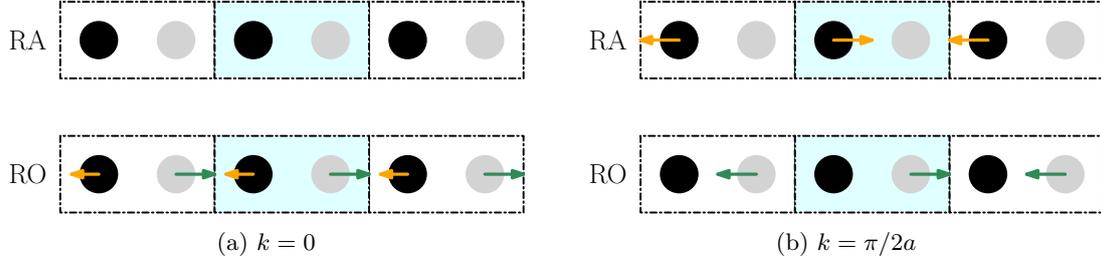


Figura 5: Amplitudes relativas para el centro y borde de la primera zona de Brillouin.

$$\omega_{\text{RO}}(k = \pi/2a) = \sqrt{\frac{2C_1 + 4C_2}{M_B}} \quad \epsilon_{\text{B}}^{\text{RO}} = 1 \quad \epsilon_{\text{A}}^{\text{RO}} = 0 \quad (18)$$

y las celdas están en contrafase (Recordar que $\mathbf{R}_p = n2a\hat{\mathbf{x}}$, $n \in \mathbb{Z}$). En la Figura 5 se diagraman las amplitudes para las diferentes ramas. Notemos además que estos resultados, nos indican el ancho del gap de frecuencias: entre $\omega = \sqrt{2C_1 + 4C_2/M_A}$ y $\omega = \sqrt{2C_1/\mu}$ no hay estados disponibles.

d) La densidad de estados de fonones $g(\omega)$ se define de forma tal que $g(\omega)d\omega$ es el número total de modos con frecuencias entre ω y $\omega + d\omega$ por unidad de volumen del cristal. Sigamos los pasos de la clase teórica. Supongamos que necesitamos calcular el número total de modos normales de un sistema. Esto implica sumar sobre todos los vectores de onda de la primera zona de Brillouin y sobre todas las ramas. Si llamamos s al índice que suma sobre ramas:

$$\sum_{\mathbf{k}, s} 1 = \sum_s 1 \cdot \sum_{\mathbf{k}} 1 = dP \cdot N \quad (19)$$

donde utilizamos que el número de estados permitidos en la 1ZB es el número de celdas N y el total de ramas está dado por dP , donde d es la dimensión del sistema y P el número de átomos en la base atómica. Si dividimos por el volumen del cristal:

$$\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, s} 1 = dP \frac{N}{V} = dPn_c \quad (20)$$

obtenemos el total de estados por unidad de volumen, con $n_c = N/V$ es la densidad de celdas. El próximo paso es convertir la suma sobre \mathbf{k} al continuo. Para esto multiplicamos y dividimos por $\Delta k = (2\pi)^3/V$ (suponemos un cristal tridimensional) que es el “volumen” que ocupa un estado en el espacio recíproco y tomamos el límite $V \rightarrow \infty$

$$\begin{aligned} dPn_c &= \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \sum_s \sum_{\mathbf{k}} 1 = \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \sum_s \sum_{\mathbf{k}} \frac{\Delta k}{\Delta k} = \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V \Delta k} \sum_s \sum_{\mathbf{k}} \Delta k \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_s \lim_{V \rightarrow \infty} \sum_{\mathbf{k}} \Delta k = \sum_s \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \end{aligned} \quad (21)$$

A continuación, introducimos la integración sobre las frecuencias: multiplicamos el integrando por “1”:

$$\begin{aligned} dPn_c &= \sum_s \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} = \sum_s \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} 1 = \sum_s \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \int d\omega \delta(\omega - \omega_s(\mathbf{k})) \\ &= \sum_s \int d\omega \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \delta(\omega - \omega_s(\mathbf{k})) = \sum_s \int d\omega g_s(\omega) \end{aligned} \quad (22)$$

donde hemos definido la densidad de estados de la rama s $g_s(\omega)$ como:

$$g_s(\omega) = \int_{1\text{ZB}} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \delta(\omega - \omega_s(\mathbf{k})) \quad (23)$$

con $g(\omega) = \sum_s g_s(\omega)$ que es el resultado obtenido en la teórica. El último paso es notar que el argumento de la delta de Dirac es cero sólo cuando $\omega = \omega_s(\mathbf{k})$, es decir cuando $\mathbf{k} \in A_s(\omega)$ donde $A_s(\omega)$ es la superficie de nivel de frecuencia constante en el espacio recíproco. Por lo tanto, la integral sobre todo el volumen del espacio recíproco queda restringido a esta zona. Usando la propiedad de la composición de la delta de Dirac, escribimos la forma final de $g_s(\omega)$

$$g_s(\omega) = \int_{1\text{ZB}} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \delta(\omega - \omega_s(\mathbf{k})) = \int_{A_s(\omega)} \frac{1}{|\nabla \omega_s(\mathbf{k})|} \frac{dA}{(2\pi)^3} \quad (24)$$

En un sistema tridimensional las superficies $A_s(\omega)$ se define con dos grados de libertad, en $d = 2$ necesita un grado de libertad, mientras que en una dimensión la integral desaparece pues la superficie de nivel son solo dos puntos del espacio recíproco. Notemos además, que si $\hbar\mathbf{k}/\omega = \omega_s(\mathbf{k})$, por ejemplo cuando hay un gap en el espectro de frecuencias, $\delta(\omega - \omega_s(\mathbf{k})) = 0$ y la densidad de estados se anula.

El problema que debemos analizar corresponde a un caso 1D. Para fijar ideas, repitamos el procedimiento anterior para esta dimensión. Partimos de la Ec. (21):

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \sum_s \sum_{\mathbf{k}} \frac{\Delta k}{\Delta k} = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L \Delta k} \sum_s \sum_{\mathbf{k}} \Delta k = \frac{1}{2\pi} \sum_s \lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{\mathbf{k}} \Delta k = \sum_s \int_{1\text{ZB}} \frac{dk}{2\pi} \quad (25)$$

En vez de integrar sobre toda la primera zona de Brillouin, integramos sobre la mitad positiva, en nuestro caso $k \in (0, \pi/2a) = 1\text{ZB}^+$:

$$\sum_s \int_{1\text{ZB}} \frac{dk}{2\pi} = 2 \sum_s \int_{1\text{ZB}^+} \frac{dk}{2\pi} \quad (26)$$

y hacemos el cambio de variables $k = k(\omega)$ invirtiendo la relación $\omega_s(k) = \omega$, permitido sin pérdida de generalidad pues $\omega_s(k)$ es biyectiva en la zona de integración

$$2 \sum_s \int_{1\text{ZB}^+} \frac{dk}{2\pi} = \sum_s \int d\omega \frac{1}{\pi} \frac{1}{\left| \frac{d\omega_s(k)}{dk} \right|} = \sum_s \int_{\omega_s^{\min}}^{\omega_s^{\max}} d\omega g_s(\omega) \quad (27)$$

donde ω_s^{\max} (ω_s^{\min}) es la frecuencia superior (inferior) perteneciente a la rama s . Especializamos este resultado para las soluciones del problema. Cuando $C_2 = 0$, $f(k) = 1$:

$$\omega_{\pm}^2(k) = \frac{C_1}{\mu} \left[1 \pm \sqrt{1 - \frac{2\mu^2}{M_A M_B} (1 - \cos(2ka))} \right] \quad \omega_- = \omega_{\text{RA}} \quad \omega_+ = \omega_{\text{RO}} \quad (28)$$

Podemos calcular la derivada de la relación de dispersión utilizando la regla de la cadena:

$$\frac{d(\omega_s^2)}{dk} = \frac{d\omega_s^2}{d\omega_s} \frac{d\omega_s}{dk} = 2\omega_s \frac{d\omega_s}{dk} \Rightarrow \frac{d\omega_s}{dk} = \frac{1}{2\omega_s} \frac{d(\omega_s^2)}{dk} \quad (29)$$

Esquematisamos los pasos para llegar al resultado. Primero, llamamos al radicando de $r(k)$

$$\omega_{\pm}^2(k) = \frac{C_1}{\mu} \left[1 \pm \sqrt{r(k)} \right] \Rightarrow r(k) = \left(\frac{\mu}{C_1} \omega_{\pm}^2 - 1 \right)^2 \quad (30)$$

donde estamos utilizando que $r(k)$ es siempre positivo en la 1ZB. Además,

$$\frac{d(\omega_s^2)}{dk} = \frac{C_1}{\mu} \frac{d \left[1 \pm \sqrt{r(k)} \right]}{dk} = \pm \frac{C_1}{2\mu \sqrt{r(k)}} \frac{dr(k)}{dk} \quad (31)$$

y

$$\frac{dr(k)}{dk} = -\frac{4\mu^2 a}{M_A M_B} \sin(2ka) = -\frac{4\mu^2 a}{M_A M_B} \left[1 - \left(1 + \frac{M_A M_B}{2\mu^2} (r(k) - 1) \right)^2 \right]^{1/2} \quad (32)$$

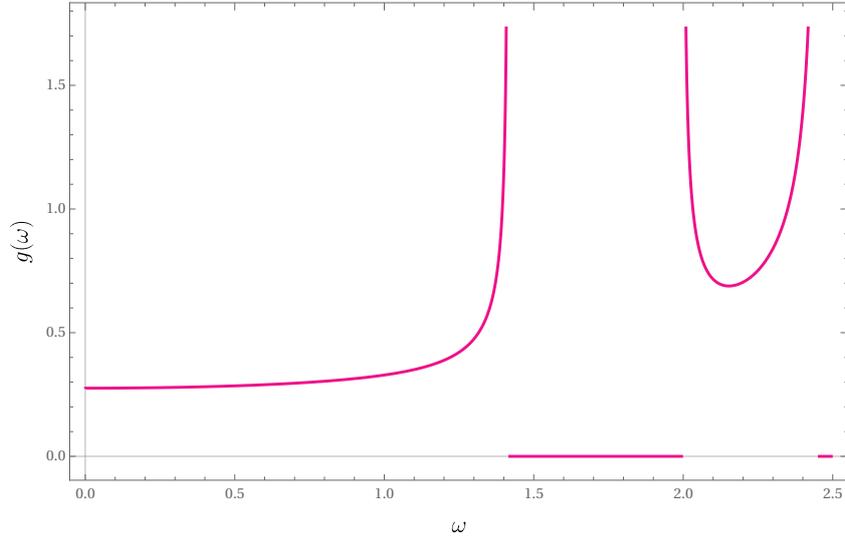
Las densidades de estados para ambas ramas son:

$$g_{\text{RA}}(\omega) = \frac{M_A M_B n_c}{\mu \pi C_1} \frac{\omega \left(1 - \frac{\mu}{C_1} \omega^2 \right)}{\sqrt{1 - \left(1 + \frac{M_A M_B}{2\mu^2} \left[\left(1 - \frac{\mu}{C_1} \omega^2 \right)^2 - 1 \right] \right)^2}} \quad (33)$$

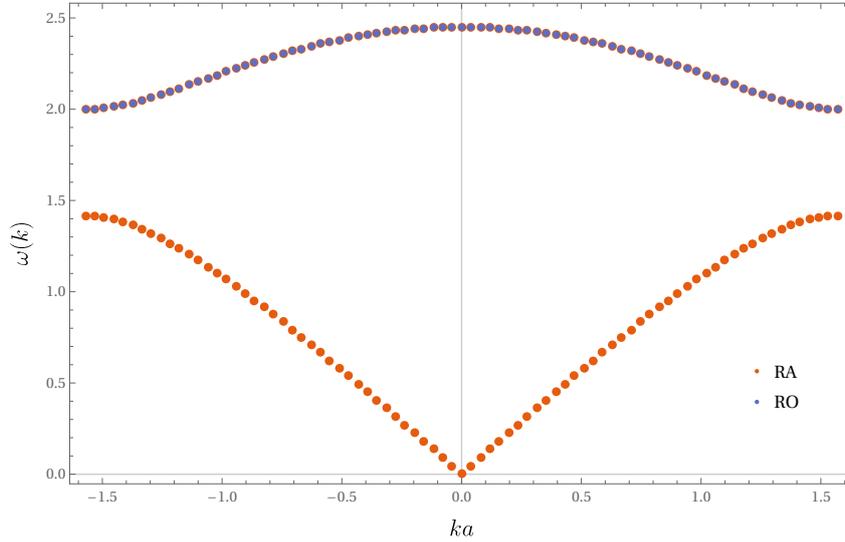
$$g_{\text{RO}}(\omega) = \frac{M_A M_B n_c}{\mu \pi C_1} \frac{\omega \left(\frac{\mu}{C_1} \omega^2 - 1 \right)}{\sqrt{1 - \left(1 + \frac{M_A M_B}{2\mu^2} \left[\left(\frac{\mu}{C_1} \omega^2 - 1 \right)^2 - 1 \right] \right)^2}} \quad (34)$$

La densidad de estados total es

$$g(\omega) = \theta(\omega - \omega_{\text{RA}}^{\min}) \theta(\omega_{\text{RA}}^{\max} - \omega) g_{\text{RA}}(\omega) + \theta(\omega - \omega_{\text{RO}}^{\min}) \theta(\omega_{\text{RO}}^{\max} - \omega) g_{\text{RO}}(\omega)$$



(a) Densidad de estados



(b) Esquema de los estados en la relación de dispersión

Figura 6: Densidad de estados de fonones y relación de dispersión.

$$g(\omega) = \theta(\omega) \theta\left(\sqrt{\frac{2C_1}{M_A}} - \omega\right) g_{RA}(\omega) + \theta\left(\omega - \sqrt{\frac{2C_1}{M_B}}\right) \theta\left(\sqrt{\frac{2C_1}{\mu}} - \omega\right) g_{RO}(\omega) \quad (35)$$

donde incluimos unas funciones escalón para asegurar que $g(\omega) \in \mathbb{R}$. En la Figura 6 mostramos la densidad de estados y las ramas óptica y acústica para $C_2 = 0$.

Veamos algunas características de la densidad de estados de fonones. Como mencionamos anteriormente $g(\omega)d\omega$ representa la cantidad de estados en $(\omega, \omega + d\omega)$. La primera característica saliente es la existencia de dos regiones donde $g(\omega) \neq 0$. La zona de frecuencias más bajas corresponde a los estados en la rama acústica, mientras la más alta a la rama óptica. Entre ellas la densidad de estados es cero pues la relación de dispersión presenta un gap de frecuencias donde no hay estados. Por otro lado, tenemos divergencias (singularidades de Van Hove) en $g(\omega)$ cerca de este gap, que son consecuencias de la acumulación de estados cerca de estas frecuencias en el borde de zona, donde $v_g = d\omega/dk = 0$, como se puede ver esquemáticamente en la Figura 6(b). Lo mismo sucede en el máximo en la rama óptica en el centro de la 1ZB que causa la última divergencia en la densidad de estados. Más aún, que $g(\omega) \sim \text{cte}$ para ω pequeños es consecuencia de la relación de dispersión de la rama acústica que, para $k \gg \pi/2a$, puede aproximarse linealmente $\omega \simeq ck$, y $g(\omega) = 1/(\pi d\omega/dk) \simeq 1/(\pi c) = \text{cte}$. De forma similar puede explicarse que la densidad de estados en el centro de la rama acústica sea menor que en el centro de la rama óptica, pues la derivada en el primer caso es mayor que en el segundo.

Ejemplo 2: Red hexagonal simple bidimensional

Considere una red hexagonal simple 2D con parámetro de red a formada por átomos con masa M y e interacciones a primeros vecinos, con constante de fuerza C .

- Calcule la matriz dinámica.
- Encuentre la densidad de estados de fonones para $k_y = 0$.
- Encuentre la densidad de estados de fonones para $k_x \sim k_y \sim 0$.

Resolución

a) La red es una red de Bravais que puede describirse con una base $\{\mathbf{a}_1 = \left(\frac{1}{2}\hat{\mathbf{x}} + \frac{\sqrt{3}}{2}\hat{\mathbf{y}}\right)a, \mathbf{a}_2 = \left(\frac{1}{2}\hat{\mathbf{x}} - \frac{\sqrt{3}}{2}\hat{\mathbf{y}}\right)a\}$, con base de un átomo $\mathbf{d}_1 = 0$ en el origen. Por lo tanto, el sistema tendrá solo dos ramas acústicas. En la Figura 7 dibujamos la celda unidad origen con todas las interacciones.

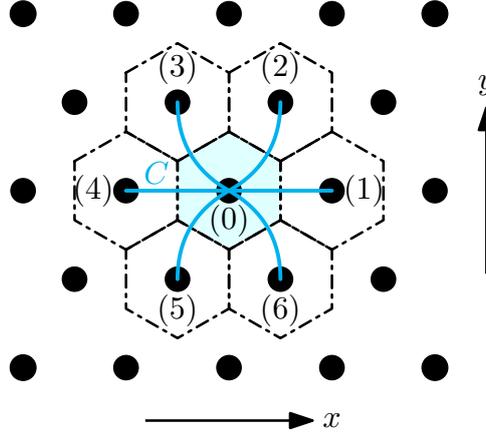


Figura 7: Celda hexagonal simple e interacciones

Como el sistema tiene un solo átomo en la celda unidad, omitimos los índices α, γ de la matriz dinámica y las constantes ϕ :

$$D^{i,l}(\mathbf{k}) = \frac{1}{M} \left[\sum_q \phi_{0,q}^{i,l} - \sum_m e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_m} \phi_{m,0}^{i,l} \right], \quad (36)$$

con

$$\phi_{1,0}^{i,l} = C\delta_{ix}\delta_{lx} \quad (37)$$

$$\phi_{2,0}^{x,x} = \frac{C}{4} \quad \phi_{2,0}^{y,y} = \frac{3C}{4} \quad \phi_{2,0}^{x,y} = \phi_{2,0}^{y,x} = \frac{\sqrt{3}C}{4} \quad (38)$$

$$\phi_{3,0}^{x,x} = \frac{C}{4} \quad \phi_{3,0}^{y,y} = \frac{3C}{4} \quad \phi_{3,0}^{x,y} = \phi_{3,0}^{y,x} = -\frac{\sqrt{3}C}{4} \quad (39)$$

con $\phi_{1,0}^{i,l} = \phi_{4,0}^{i,l}$, $\phi_{2,0}^{i,l} = \phi_{5,0}^{i,l}$, $\phi_{3,0}^{i,l} = \phi_{6,0}^{i,l}$ y $\phi_{m,0}^{i,l} = \phi_{0,m}^{i,l}$. La matriz dinámica es (se deja como ejercicio)

$$D(\mathbf{k}) = \frac{C}{M} \begin{pmatrix} 3 - 2\cos(k_x a) - \cos\left(k_x \frac{a}{2}\right) \cos\left(k_y \frac{\sqrt{3}a}{2}\right) & \sqrt{3} \sin\left(k_x \frac{a}{2}\right) \sin\left(k_y \frac{\sqrt{3}a}{2}\right) \\ \sqrt{3} \sin\left(k_x \frac{a}{2}\right) \sin\left(k_y \frac{\sqrt{3}a}{2}\right) & 3 - 3\cos\left(k_x \frac{a}{2}\right) \cos\left(k_y \frac{\sqrt{3}a}{2}\right) \end{pmatrix} \quad (40)$$

b) Cuando $k_x = 0$, la matriz dinámica es diagonal:

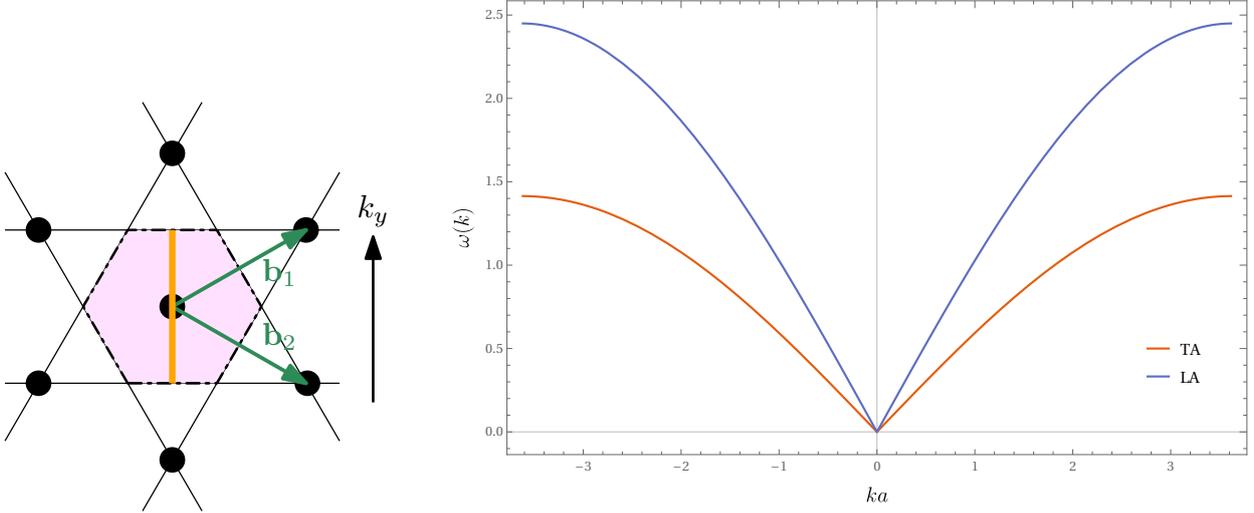
$$D(\mathbf{k}) = \frac{C}{M} \begin{pmatrix} 1 - \cos\left(k_y \frac{\sqrt{3}a}{2}\right) & 0 \\ 0 & 3 - 3\cos\left(k_y \frac{\sqrt{3}a}{2}\right) \end{pmatrix} \quad (41)$$

y las dos ramas acústicas dan:

$$\omega_{\text{TA}}(k_x = 0, k_y) = \sqrt{\frac{2C}{M}} \left| \sin\left(\frac{\sqrt{3}k_y a}{4}\right) \right| \quad \omega_{\text{LA}}(k_x = 0, k_y) = \sqrt{\frac{6C}{M}} \left| \sin\left(\frac{\sqrt{3}k_y a}{4}\right) \right|, \quad (42)$$

o $\omega_{\text{LA}}(k_x = 0, k_y) = \sqrt{3}\omega_{\text{TA}}(k_x = 0, k_y)$, donde LA y TA representan los modos longitudinal acústico y transversal acústico, respectivamente.

En una red hexagonal simple, la red recíproca también es hexagonal con vectores recíprocos $\{\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}(\sqrt{3}\hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{y}}), \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}(\sqrt{3}\hat{\mathbf{x}} - \hat{\mathbf{y}})\}$. La primera zona de Brillouin, que es la celda de Wigner-Seitz del espacio recíproco, también es un hexágono, como se muestra en la Figura 8(a). Sobre el eje k_y , la 1ZB está restringida a la recta entre los puntos $-\frac{1}{2}(\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2)$ y $\frac{1}{2}(\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2)$, o, más sencillamente, $k_y \in (-\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, \frac{2\pi}{\sqrt{3}a})$. En la Figura 8(b) se muestra la relación de dispersión restringida a $k_x = 0$.



(a) Primera zona de Brillouin para la red hexagonal simple bidimensional. En naranja, la 1ZB restringida a $k_x = 0$.

(b) Relación de dispersión con $k_x = 0$

Figura 8: Primera zona de Brillouin para una red hexagonal simple y relación de dispersión restringida a $k_x = 0$.

Con la restricción sobre el espacio recíproco, la densidad de estados es efectivamente del caso 1D, y podemos seguir los pasos del ejemplo anterior:

$$g_s(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{1}{\left| \frac{d\omega_s}{dk} \right|} \quad (43)$$

Calculamos la derivada de la relación de dispersión:

$$\begin{aligned} \frac{d\omega_s}{dk_y} &= \sqrt{\frac{t_s C}{M} \frac{\sqrt{3}a}{4}} \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_y a}{4}\right) = \frac{\sqrt{3}a}{4} \sqrt{\frac{t_s C}{M} - \frac{t_s C}{M} \sin^2\left(\frac{\sqrt{3}k_y a}{4}\right)} \\ &= \frac{\sqrt{3}a}{4} \sqrt{(\omega_s^{\text{máx}})^2 - \omega_s^2} \end{aligned} \quad (44)$$

con $t_s = 2$ para $s = \text{TA}$, $t_s = 6$ para $s = \text{LA}$ y $\omega_s^{\text{máx}} = \sqrt{t_s C/M}$ es el máximo de la rama s . La densidad de estados:

$$g_s(\omega) = \frac{\sqrt{3}a}{4\pi} \frac{1}{\sqrt{(\omega_s^{\text{máx}})^2 - \omega^2}} \quad g(\omega) = \theta(\omega_{\text{TA}}^{\text{máx}} - \omega)g_{\text{TA}}(\omega) + \theta(\omega_{\text{LA}}^{\text{máx}} - \omega)g_{\text{LA}}(\omega) \quad (45)$$

que se muestra en la Figura 9. Tenemos dos divergencias que corresponden a las frecuencias cercanas al borde de zona para ambas ramas. Antes de la primera divergencia ambas ramas contribuyen a la densidad de estados, mientras que posteriormente sólo contribuye ω_{LA} .

c) En este caso obtenemos, luego de aproximar a segundo orden:

$$\omega_1(k_x, k_y) = \sqrt{\frac{C}{M}} \sqrt{\frac{9}{2} \left(\frac{k_x a}{2}\right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{k_y \sqrt{3}a}{2}\right)^2} \quad \omega_2(k_x, k_y) = \sqrt{\frac{C}{M}} \sqrt{\frac{3}{2} \left(\frac{k_x a}{2}\right)^2 + \frac{3}{2} \left(\frac{k_y \sqrt{3}a}{2}\right)^2} \quad (46)$$

Para calcular la densidad de estados en este caso utilizamos el resultado de la Ec.(23) en 2D

$$g_s(\omega) = \int_{\text{1ZB}} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \delta(\omega - \omega_s(\mathbf{k})) \quad (47)$$

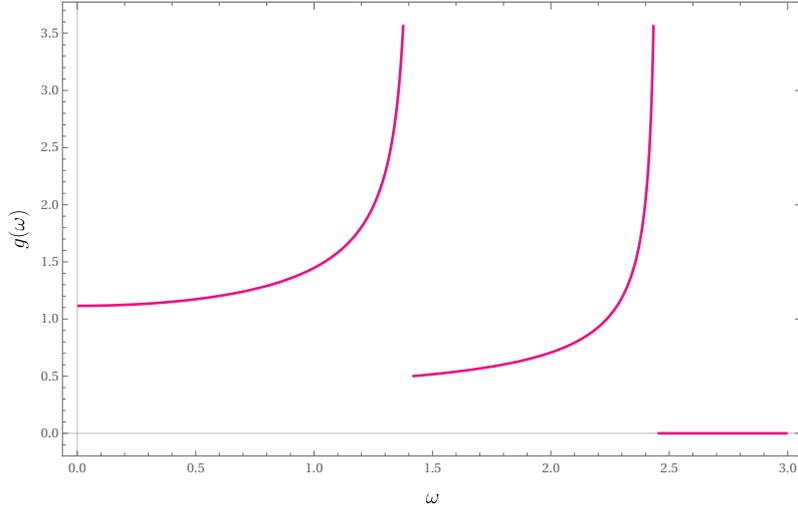


Figura 9: Densidad de estados restringida a $k_x = 0$.

Para la rama 1, tenemos

$$g_1(\omega) = \int_{1ZB} \frac{dk_x dk_y}{(2\pi)^2} \delta \left(\omega - \sqrt{\frac{C}{M}} \sqrt{\frac{9}{2} \left(\frac{k_x a}{2} \right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{k_y \sqrt{3} a}{2} \right)^2} \right) \quad (48)$$

Ahora hacemos el cambio de variables $k_y = \sqrt{3} \tilde{k}_y$, $k_x = \tilde{k}_x$

$$\begin{aligned} g_1(\omega) &= \int_{1ZB} \frac{d\tilde{k}_x \sqrt{3} d\tilde{k}_y}{(2\pi)^2} \delta \left(\omega - \sqrt{\frac{C}{M}} \sqrt{\frac{9}{2} \left(\frac{\tilde{k}_x a}{2} \right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{\tilde{k}_y 3a}{2} \right)^2} \right) \\ &= \int_{1ZB} \frac{d\tilde{k}_x \sqrt{3} d\tilde{k}_y}{(2\pi)^2} \delta \left(\omega - \sqrt{\frac{9Ca^2}{8M}} \sqrt{\tilde{k}_x^2 + \tilde{k}_y^2} \right) \end{aligned} \quad (49)$$

En coordenadas polares, llamando $c = \sqrt{\frac{9Ca^2}{8M}}$:

$$g_1(\omega) = \int_{1ZB} \frac{d\varphi d\tilde{k}}{(2\pi)^2} \sqrt{3} \tilde{k} \delta(\omega - c\tilde{k}) = \int_{1ZB} \frac{d\varphi dk'}{(2\pi)^2} \frac{\sqrt{3}}{c^2} k' \delta(\omega - k') = \frac{\sqrt{3}\omega}{2\pi c^2} = \frac{2n_c}{3\pi} \frac{M}{C} \omega \quad (50)$$

que es el resultado esperado para una relación de dispersión lineal en 2D. Se puede mostrar que el mismo resultado se obtiene para $g_2(\omega)$.