

Estructura de la Materia 2

Clase 5 - Teoría

Docentes

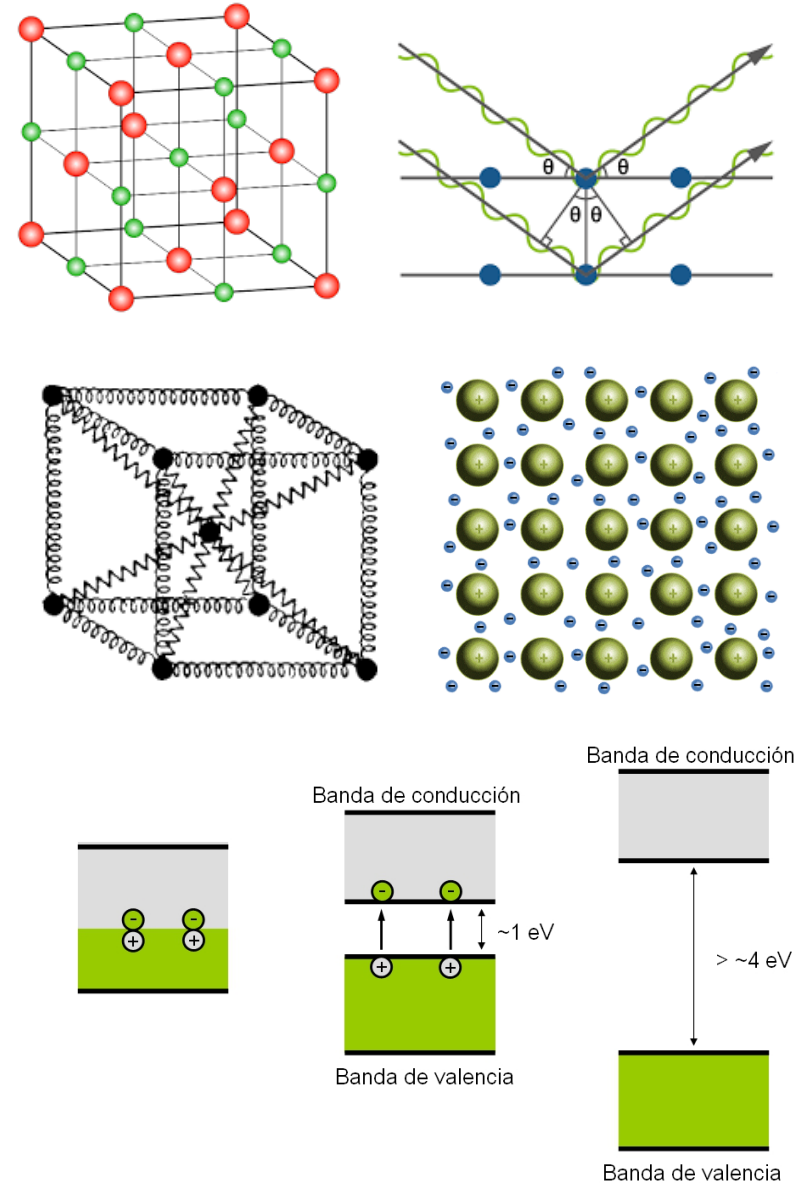
Gustavo Grinblat, Mariano Marziali Bermúdez, Tomás Bortolin

Departamento de Física, FCEN, UBA - 1er Cuatrimestre, 2020

Web: <http://materias.df.uba.ar/edlm2a2020c1>

Programa de la materia

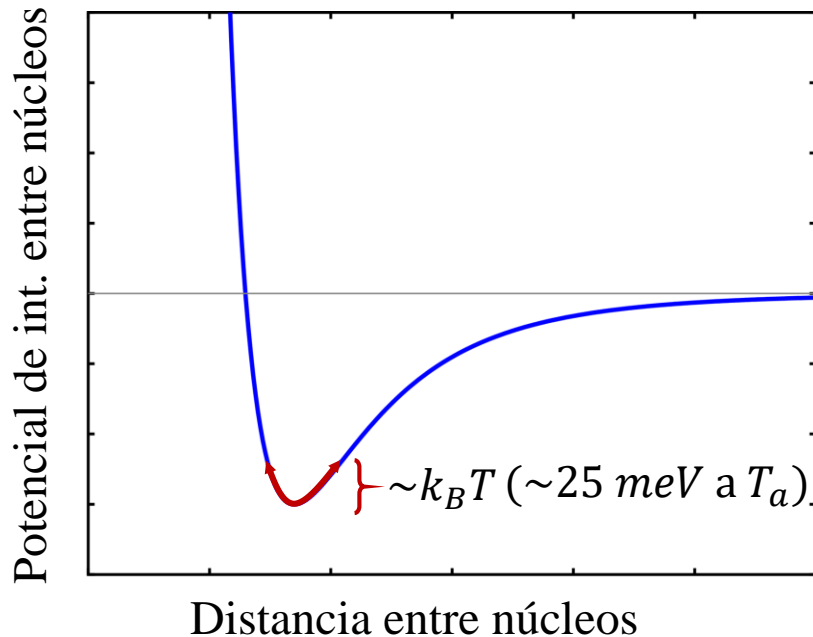
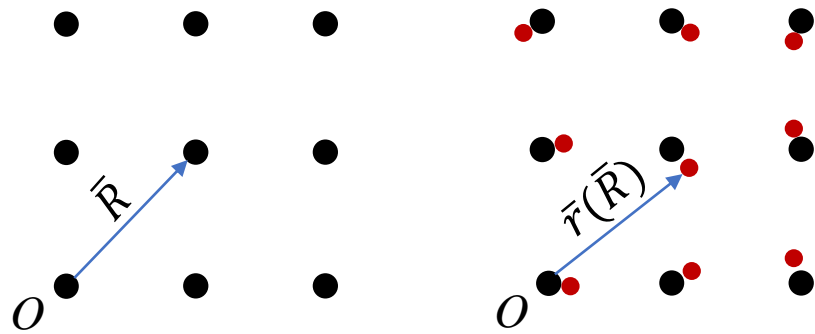
- Red cristalina y red recíproca ✓
- Difracción de rayos X ✓
- Cohesión en sólidos ✓
- Vibraciones y fonones
 - Modos de vibración y fonones
 - Propiedades térmicas
- Electrones en sólidos
- Semiconductores



Modos vibracionales

Posición de los núcleos en un cristal real

Los núcleos en un sólido **no** se encuentran fijos en el espacio.



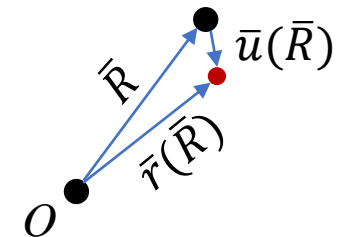
$$\bar{r}(\bar{R}, t) = \bar{R} + \bar{u}(\bar{R}, t)$$

- **Asumimos** que los núcleos oscilan alrededor de posiciones de equilibrio, las cuales determinan una RB.

→ La configuración cristalina varía instante a instante, y la estructura observada corresponde a un promedio.

- **Asumimos** que el desplazamiento de los núcleos respecto a las posiciones de equilibrio es mucho menor a la distancia interatómica.

$$\begin{aligned} U &= \frac{1}{2} \sum_{\bar{R}\bar{R}'} \phi(\bar{r}(\bar{R}) - \bar{r}(\bar{R}')) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\bar{R}\bar{R}'} \phi(\bar{R} - \bar{R}' + u(\bar{R}) - u(\bar{R}')) \end{aligned}$$



Modos vibracionales: Aproximación armónica

Aproximación armónica en 1D (desarrollo de Taylor a segundo orden en torno al equilibrio)

$$\underbrace{\phi(R - R' + u(R) - u(R'))}_{f(x+h); x=R-R'; h=u(R)-u(R')} = \underbrace{\phi(\bar{R} - \bar{R}')}_{U_{eq}} + \frac{\partial \phi(R - R')}{\partial r} (u(R) - u(R')) + \underbrace{\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \phi(R - R')}{\partial r^2} (u(R) - u(R'))^2}$$

$f(x+h); x=R-R'; h=u(R)-u(R')$

U_{eq}

$$U = \frac{1}{2} \sum_{RR'} \phi(R - R' + u(R) - u(R')) = \frac{1}{2} \sum_{RR'} \phi(\bar{R} - \bar{R}') + \frac{1}{2} \sum_{RR'} \frac{\partial \phi(R - R')}{\partial r} (u(R) - u(R')) + \frac{1}{2} \sum_{RR'} [\quad]$$

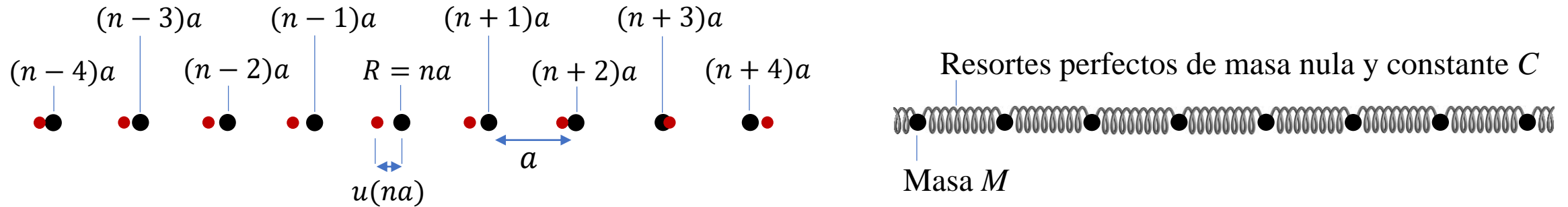
$$U = U_{eq} + \frac{1}{4} \sum_{RR'} \frac{\partial^2 \phi(R - R')}{\partial r^2} (u(R) - u(R'))^2$$

$$\sum_R \underbrace{\sum_{R'} \frac{\partial \phi(R - R')}{\partial r} u(R)}_{=0} - \sum_{R'} \underbrace{\sum_R \frac{\partial \phi(R - R')}{\partial r} u(R')}_{=0} = 0 \text{ (Fuerza neta sobre el núcleo } R \text{ en el equilibrio)}$$

$\frac{\partial^2 \phi(R - R')}{\partial r^2} \longrightarrow$ Constantes de fuerza determinadas por la curvatura del potencial de interacción.

Modos vibracionales: Cadena unidimensional

Modos normales de una RB unidimensional



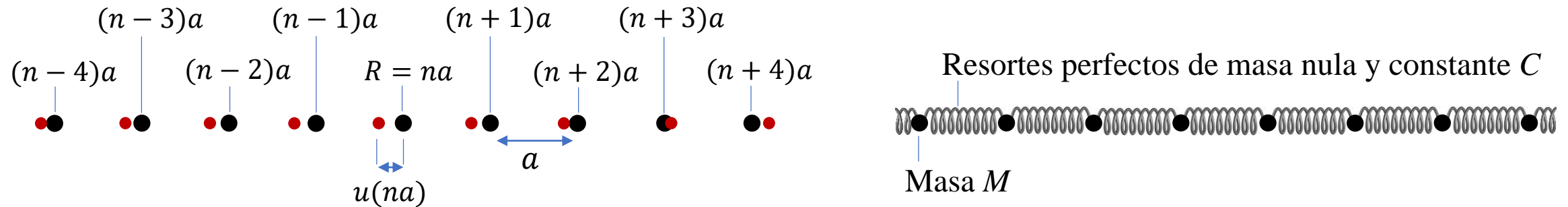
Interacción a primeros vecinos:
$$U_a = \frac{1}{4} \sum_{RR'} \frac{\partial^2 \phi(R - R')}{\partial r^2} (u(R) - u(R'))^2 = \frac{1}{2} \overset{\phi''(a)}{C} \sum_i [u(ia) - u([i + 1]a)]^2$$

Ecuaciones de movimiento

$$\begin{aligned} M\ddot{u}(na) &= -\frac{\partial U_a}{\partial u(na)} = -\frac{1}{2} C \frac{\partial (\dots + \overbrace{[u([n-1]a) - u(na)]^2}^{i=n-1} + \overbrace{[u(na) - u([n+1]a)]^2}^{i=n}} \dots)}{\partial u(na)} \\ &= -C [2u(na) - u([n-1]a) - u([n+1]a)] \end{aligned}$$

Modos vibracionales: Cadena unidimensional

Modos normales de una RB unidimensional



Cadena finita

Si la red tiene un número finito N de núcleos con N muy grande, y no nos interesan efectos de borde, entonces resulta irrelevante cómo tratemos a los extremos, y podemos elegir la condición que nos resulte conveniente.

→ Condiciones de contorno periódicas de Born-von Karman: $u([N + 1]a) = u(a)$; $u(0) = u(Na)$

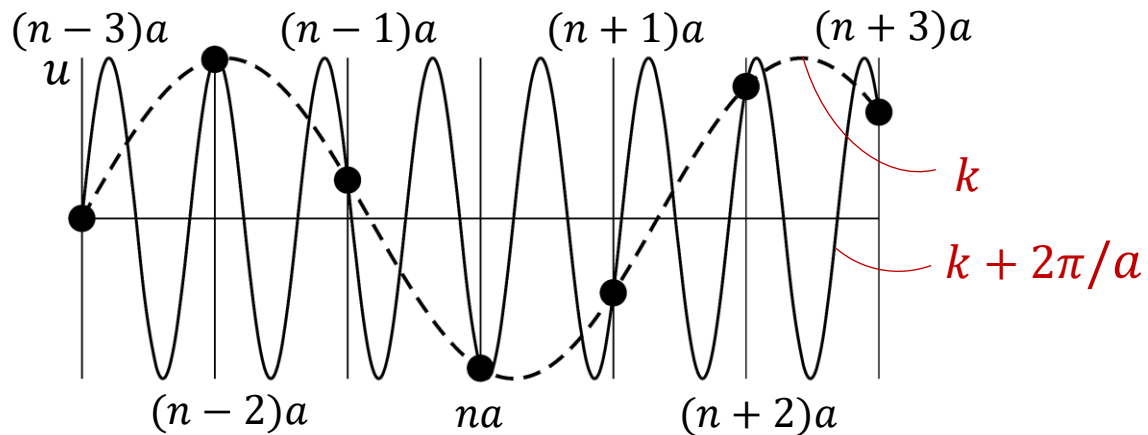
Buscamos soluciones de la forma: $u(na, t) = \epsilon e^{i(kna - \omega t)}$ → $e^{ikNa} = 1$ → $k = \frac{2\pi m}{a N}$, m entero

Como desplazar a k en $2\pi/a$ no altera el valor de $u(na)$ → Existen exactamente N soluciones (modos normales) diferentes.

→ Elegimos tomar k entre $-\pi/a$ y π/a .

Modos vibracionales: Cadena unidimensional

Modos normales de una RB unidimensional: Cadena finita



Ambas ondas toman el mismo valor sobre los distintos puntos de la red, y difieren solo entre ellos.

Como la onda física está definida solo sobre los puntos de la red, entonces ambas ondas son completamente equivalentes.

Frecuencias de modos normales

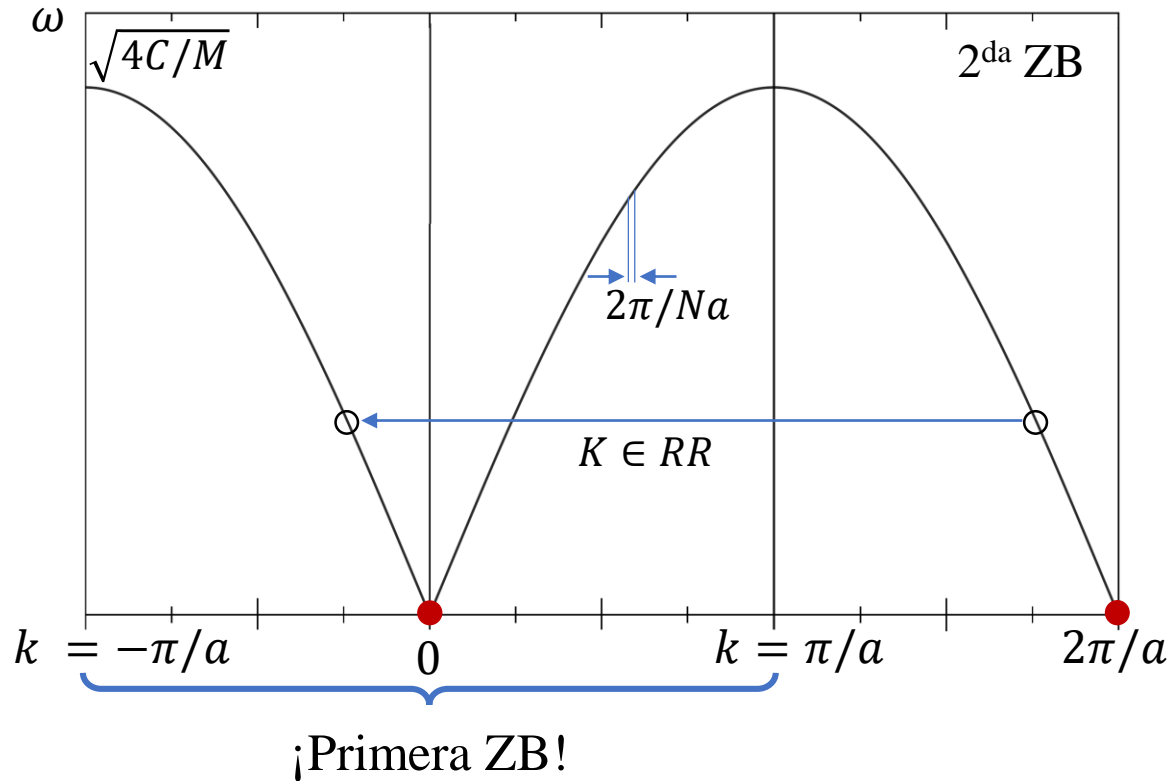
$$\begin{cases} M\ddot{u}(na) = -C[2u(na) - u([n-1]a) - u([n+1]a)] \\ u(na, t) = \epsilon e^{i(kna - \omega t)} \end{cases}$$

$$\begin{aligned} \rightarrow -M\omega^2 e^{i(kna - \omega t)} &= -C[2 - e^{-ika} - e^{ika}] e^{i(kna - \omega t)} \\ &= -2C[1 - \cos(ka)] e^{i(kna - \omega t)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \omega(k) &= \sqrt{\frac{2C(1 - \cos(ka))}{M}} \\ &= 2 \sqrt{\frac{C}{M}} \left| \text{sen} \left(\frac{1}{2} ka \right) \right| \\ &\quad \downarrow \\ &= \frac{1 - \cos(ka)}{2} = \text{sen}^2 \frac{1}{2} ka \end{aligned}$$

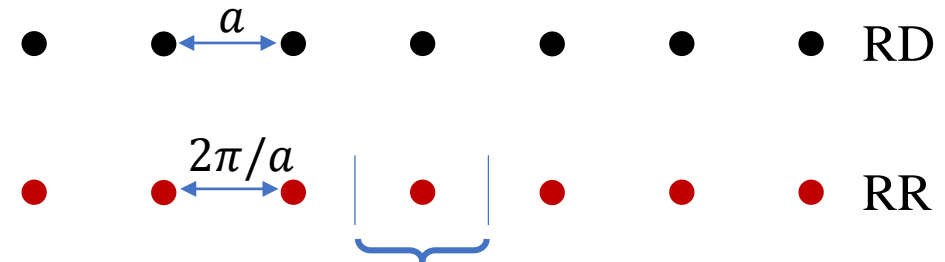
Modos vibracionales: Cadena unidimensional

Modos normales de una RB unidimensional: Cadena finita



Cualquier k fuera de la 1ª ZB puede trasladarse a un k' equivalente dentro de la 1ª ZB a través de un vector de la RR.

$$\omega(k) = 2 \sqrt{\frac{C}{M}} \left| \text{sen} \left(\frac{1}{2} ka \right) \right|$$



Celda de WZ (1ª ZB)

Casos límites

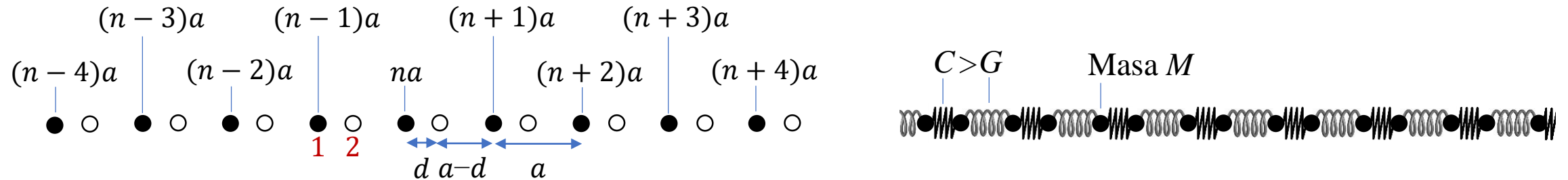
- $k \ll \pi/a \rightarrow \omega(k) = \underbrace{a\sqrt{C/M}}_{=c} |k|$

Velocidad de fase
 $= c = v_g = \partial\omega/\partial k$
Velocidad de grupo

Relación de dispersión de tipo sonido/luz ($\omega = ck$).
- $k = \pm\pi/a \rightarrow v_g = 0$

Modos vibracionales: Cadena unidimensional con base

Modos normales de una red unidimensional con una base



Interacción a primeros vecinos:
$$U_a = \frac{C}{2} \sum_i [u_1(ia) - u_2(ia)]^2 + \frac{G}{2} \sum_j [u_2(ja) - u_1([j+1]a)]^2$$

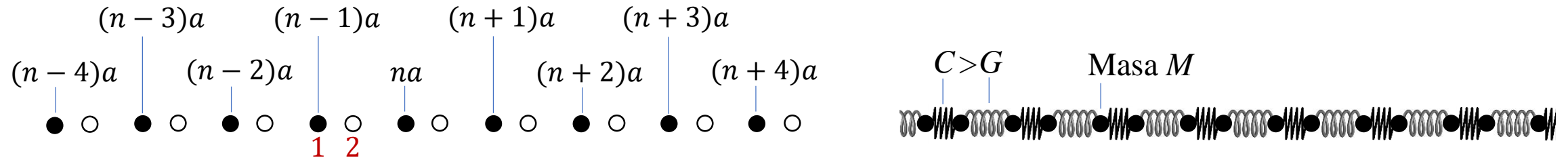
Ecuaciones de movimiento

$$\begin{aligned} M\ddot{u}_1(na) &= -\frac{\partial U_a}{\partial u_1(na)} = -\frac{1}{2} \frac{\partial (\dots + \overbrace{C[u_1(na) - u_2(na)]^2}^{i=n} + \overbrace{G[u_2([n-1]a) - u_1(na)]^2}^{j=n-1} \dots)}{\partial u_1(na)} \\ &= -C[u_1(na) - u_2(na)] - G[u_1(na) - u_2([n-1]a)] \end{aligned}$$

$$M\ddot{u}_2(na) = -\frac{\partial U_a}{\partial u_2(na)} = -C[u_2(na) - u_1(na)] - G[u_2(na) - u_1([n+1]a)]$$

Modos vibracionales: Cadena unidimensional con base

Modos normales de una red unidimensional con una base



Frecuencias y amplitudes de modos normales

$$\begin{cases} M\ddot{u}_1(na) = -C[u_1(na) - u_2(na)] - G[u_1(na) - u_2((n-1)a)] \\ M\ddot{u}_2(na) = -C[u_2(na) - u_1(na)] - G[u_2(na) - u_1((n+1)a)] \end{cases} \quad \begin{cases} u_1(na, t) = \epsilon_1 e^{i(kna - \omega t)} \\ u_2(na, t) = \epsilon_2 e^{i(kna - \omega t)} \end{cases}$$

$$\rightarrow \begin{cases} -M\omega^2 \epsilon_1 = -C[\epsilon_1 - \epsilon_2] - G[\epsilon_1 - \epsilon_2 e^{-ika}] \\ -M\omega^2 \epsilon_2 = -C[\epsilon_2 - \epsilon_1] - G[\epsilon_2 - \epsilon_1 e^{ika}] \end{cases} \rightarrow \begin{cases} [M\omega^2 - (C + G)]\epsilon_1 + [C + G e^{-ika}]\epsilon_2 = 0 \\ [M\omega^2 - (C + G)]\epsilon_2 + [C + G e^{ika}]\epsilon_1 = 0 \end{cases}$$

$$\rightarrow [M\omega^2 - (C + G)]^2 = |C + G e^{-ika}|^2 = C^2 + G^2 + 2CG \cos(ka)$$

$$\rightarrow \boxed{\omega^2 = \frac{C + G}{M} \pm \frac{1}{M} \sqrt{C^2 + G^2 + 2CG \cos(ka)}}$$

Dividiendo entre sí

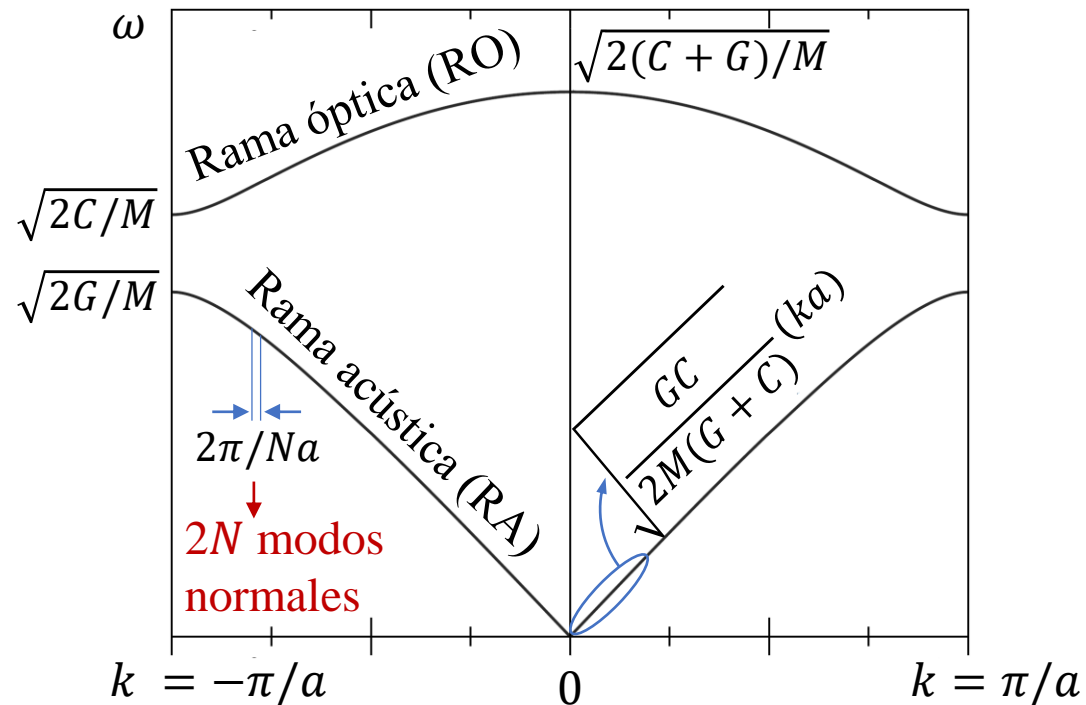
$$\boxed{\frac{\epsilon_2}{\epsilon_1} = \mp \frac{C + G e^{ika}}{|C + G e^{ika}|}}$$

Modos vibracionales: Cadena unidimensional con base

Modos normales de una red unidimensional con una base: Cadena finita

$$\omega^2 = \frac{C + G}{M} \pm \frac{1}{M} \sqrt{C^2 + G^2 + 2CG \cos(ka)}$$

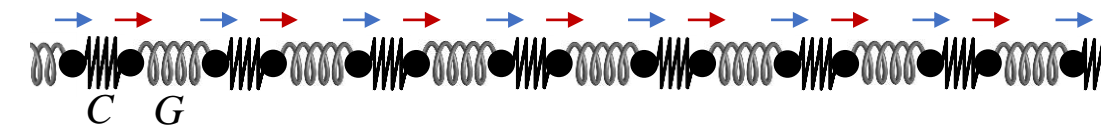
$$\begin{cases} u_1 = \epsilon_1 e^{i(kna - \omega t)} \\ u_2 = \epsilon_2 e^{i(kna - \omega t)} \end{cases} \quad \frac{\epsilon_2}{\epsilon_1} = \mp \frac{C + Ge^{ika}}{|C + Ge^{ika}|}$$



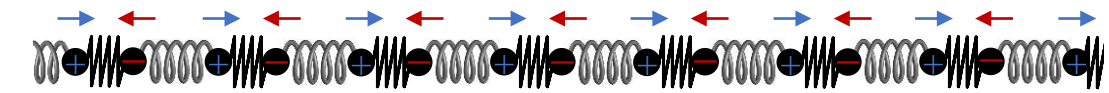
Casos límites

- $k \ll \pi/a \rightarrow \frac{\epsilon_2}{\epsilon_1} = \mp 1$ (-: RO; +: RA)

RA: $\omega \sim \text{kHz}$

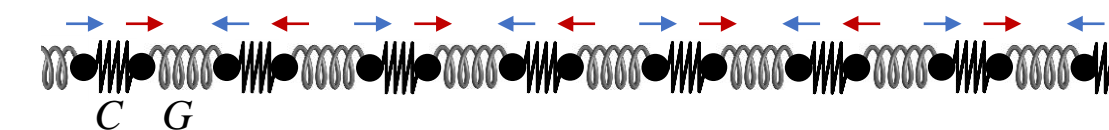


RO: $\omega \sim \text{THz}$ (En un sólido iónico podría acoplarse a una OE)

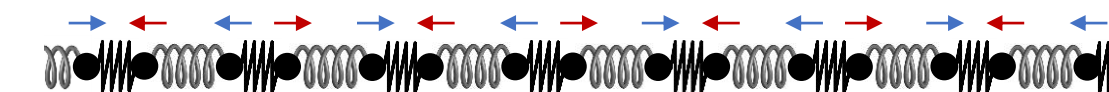


- $k = \pi/a \rightarrow \frac{\epsilon_2}{\epsilon_1} = \mp 1$ (-: RO; +: RA)

RA:



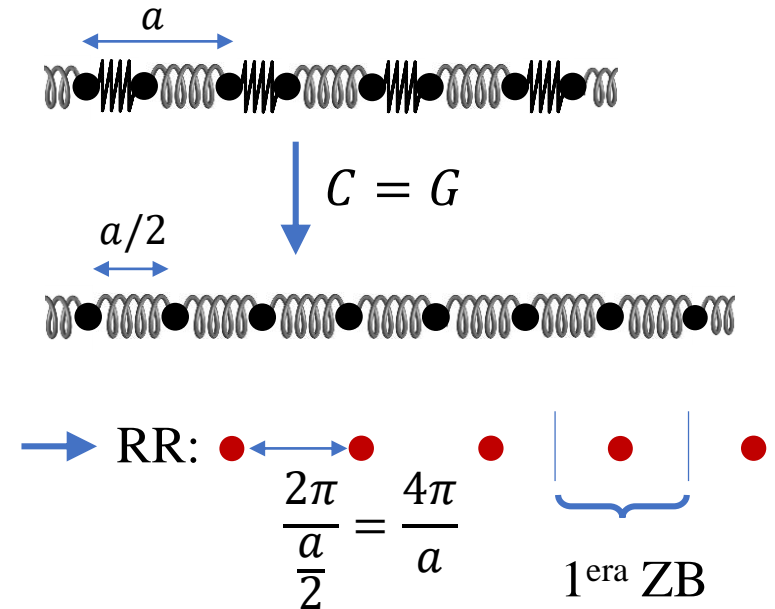
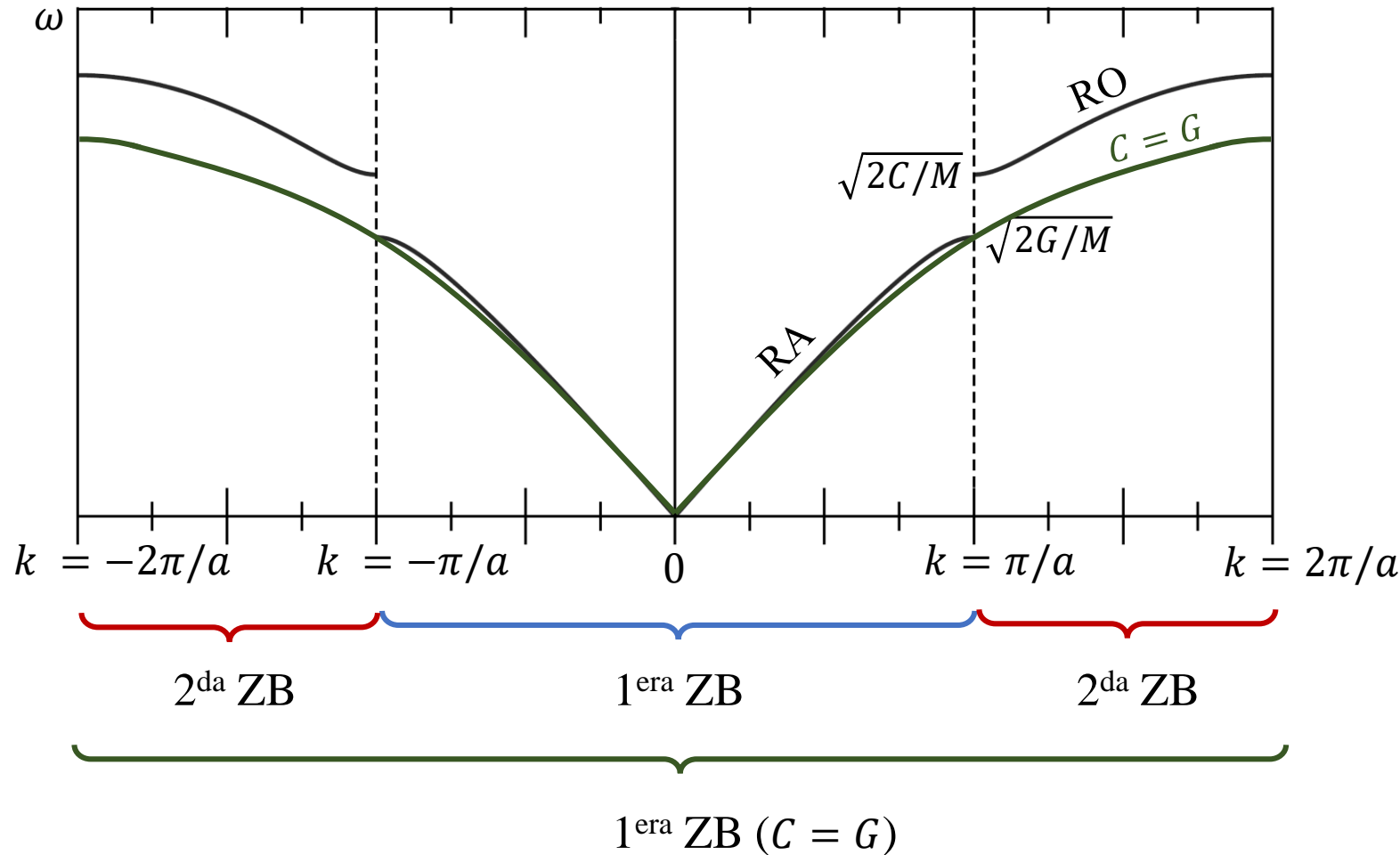
RO:



Modos vibracionales: Cadena unidimensional con base

Modos normales de una red unidimensional con una base: Cadena finita

Esquema extendido (un único modo para cada valor de k)



Cuando $C = G$ la red se convierte en una RB 1D de parámetro de red $a/2$ con 1era ZB del doble de tamaño.

Resumen

- Posición de núcleos en un cristal real
- Aproximación armónica
- Modos normales de una cadena lineal (RB)
- Modos normales de una cadena lineal (RB + base)
- Cadena finita

