

Oscilaciones del cristal

**Teoría clásica de las oscilaciones
armónicas del cristal**

Prof. Alberto Camjayi

Introducción

Aproximación armónica [Dove, Ashcroft]

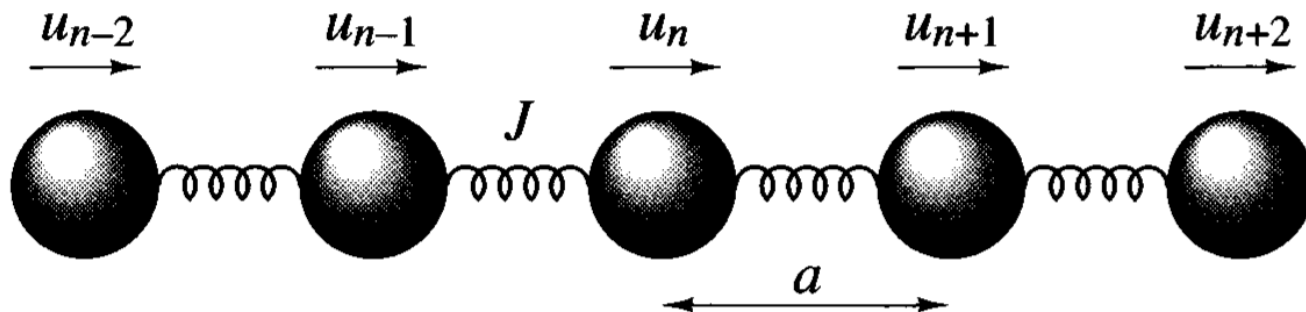
Para obtener una descripción más realista de la red cristalina, vamos a introducir la posibilidad de que los iones ejecuten oscilaciones alrededor de sus posiciones de equilibrio.

- Vamos a suponer que las oscilaciones son **armónicas**.
Algunos efectos, como conductividad térmica y expansión térmica, requieren de la inclusión de efectos anarmónicos para su correcta descripción.
- Además, consideraremos que los desplazamientos son mucho menores que las distancias inter-iónicas. Esto es cierto para la mayoría de los sólidos, salvo para el helio sólido.

Introducción

Cadena monoatómica

Comenzaremos con dos ejemplos sencillos y luego construiremos la teoría general.



Como $u_n \ll a$, podemos hacer un desarrollo de Taylor de la energía (condiciones periódicas de contorno, BvK):

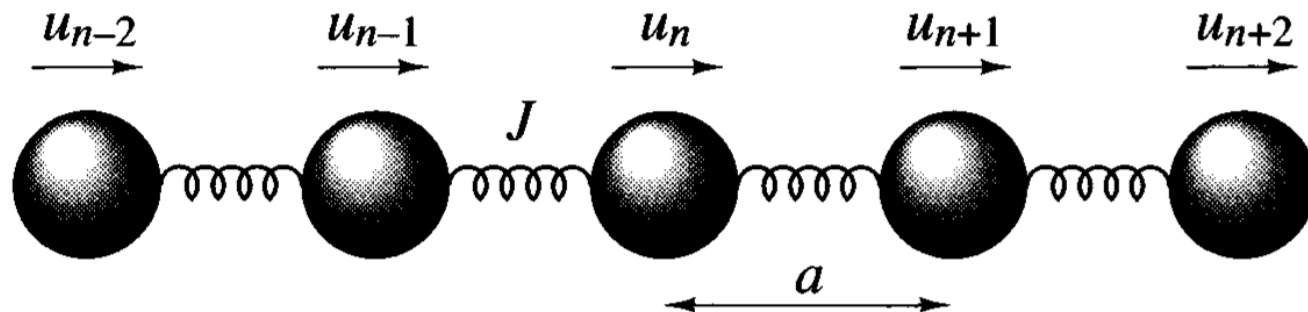
$$E = E_0 + \sum_{s \geq 1} \frac{1}{s!} \frac{\partial^s \varphi}{\partial u^s} \sum_n (u_n - u_{n-1})^s$$

donde $\varphi(d)$ es la energía de interacción entre pares a distancia d .

Introducción

Cadena monoatómica

Comenzaremos con dos ejemplos sencillos y luego construiremos la teoría general.

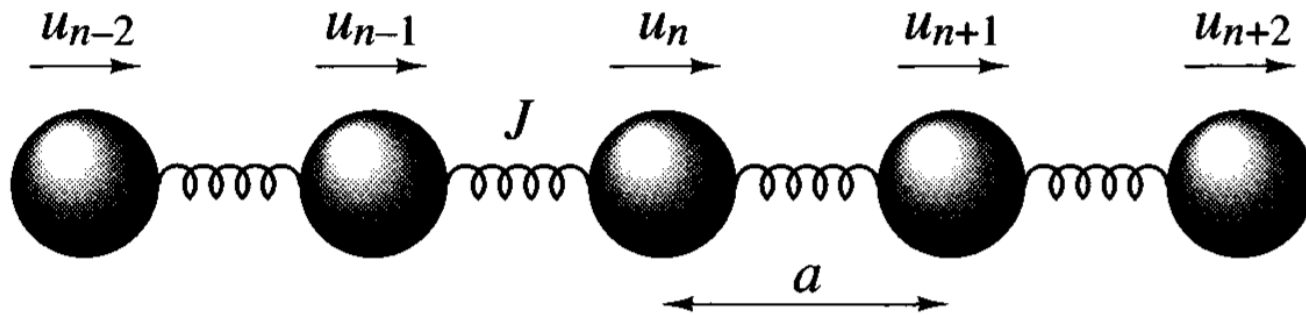


La distancia entre dos átomos consecutivos, n y $n-1$, es $r = a + (u_n - u_{n-1})$, por lo tanto las derivadas respecto de r y de u son equivalentes. Las derivadas se evalúan en la posición de equilibrio y, por lo tanto, la derivada primera se anula. Por lo tanto, en la aproximación armónica...

Introducción

Cadena monoatómica

Comenzaremos con dos ejemplos sencillos y luego construiremos la teoría general.



$$E = \frac{1}{2} J \sum_n (u_n - u_{n-1})^2; \quad \frac{\partial^2 \varphi}{\partial u^2} = J$$

$$m \frac{\partial^2 u_n}{\partial t^2} = - \frac{\partial E}{\partial u_n} = -J(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1})$$

Introducción

Cadena monoatómica

Proponiendo una solución en modos normales

$$u_n(t) = \sum_k A_k e^{i(kx - \omega_k t)}$$

con $k = \frac{2\pi}{V}m = \frac{2\pi}{Na}m \in 1\text{BZ}$, determinados por BvK.

Reemplazando en las ecuaciones de Newton:

$$m\omega_k^2 = 2J(1 - \cos ka) \implies \omega_k^2 = \frac{4J}{m} \sin^2 \left(\frac{ka}{2} \right)$$

$$\omega_k = \sqrt{\frac{4J}{m}} \left| \sin \left(\frac{ka}{2} \right) \right|$$

Introducción

Cadena monoatómica, límite onda larga

A medida que $k \rightarrow 0$ podemos tomar la aproximación lineal en la relación de dispersión

$$\omega(k \rightarrow 0) = a\sqrt{\frac{J}{m}}|k|,$$

lo que nos da una velocidad de fase $c = \frac{\omega}{k} = a\sqrt{\frac{J}{m}}\text{signo}(k)$,

que es equivalente a la velocidad del sonido en el cristal.

Debido a esta relación con las ondas de sonido, es que a los modos vibracionales con una *relación de dispersión que va a cero en el límite de onda larga*, se los denomina **modos acústicos**.

Introducción

Cadena monoatómica, largo alcance

Si la interacción se extiende más allá de primeros vecinos, la generalización es directa:

$$E = \frac{1}{2} \sum_{n,p} J_p (u_n - u_{n-p})^2; \quad \left. \frac{\partial^2 \varphi_p}{\partial u^2} \right|_{\text{eq}} = J_p$$

$$m \frac{\partial^2 u_n}{\partial t^2} = - \frac{\partial E}{\partial u_n} = - \sum_p J_p (2u_n - u_{n+p} - u_{n-p})$$

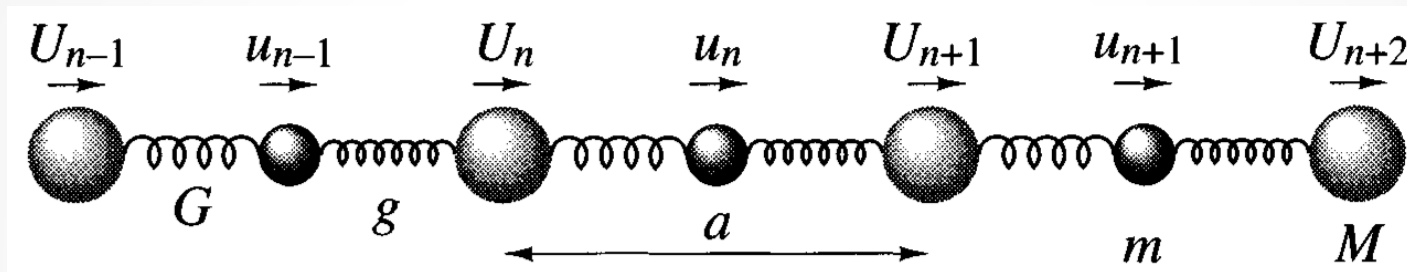
$$\omega_k^2 = \frac{4}{m} \sum_p J_p \sin^2 \left(\frac{kap}{2} \right)$$

Estos resultados son solo una pequeña modificación al caso visto anteriormente.

Cadena diatómica

Modelo básico, primeros vecinos

Avancemos ahora al caso con dos átomos en la base, en una cadena 1D.



$$E = \frac{1}{2} \sum_n [G(U_n - u_n)^2 + g(u_{n-1} - U_n)^2]$$

$$\rightarrow \begin{cases} m \frac{\partial^2 u_n}{\partial t^2} = -\frac{\partial E}{\partial u_n} = -(G + g)u_n + gU_{n+1} + GU_n \\ m \frac{\partial^2 U_n}{\partial t^2} = -\frac{\partial E}{\partial U_n} = -(G + g)U_n + gu_{n-1} + Gu_n \end{cases}$$

Cadena diatómica

Modelo básico, primeros vecinos

Proponemos nuevamente modos normales

$$u_n(t) = \sum_k A_k e^{i(kx - \omega_k t)} \quad U_n(t) = \sum_k B_k e^{i(kx - \omega_k t)}$$

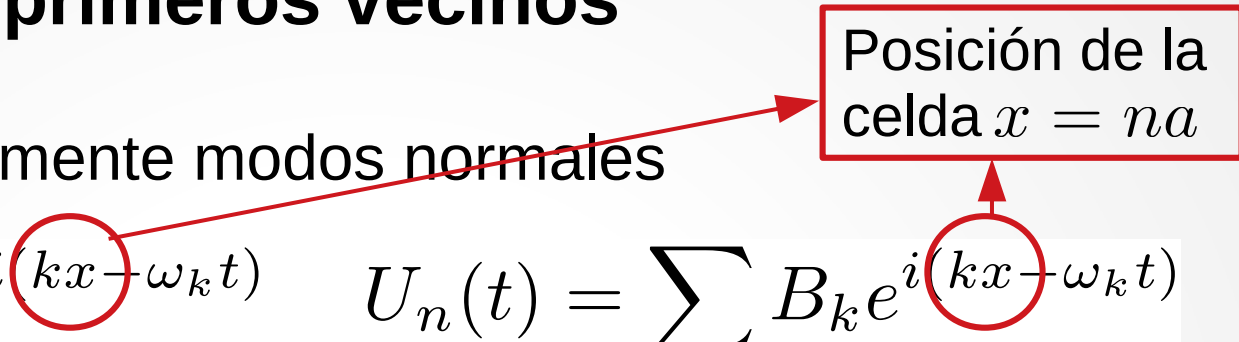
donde ahora las amplitudes pueden ser complejas, para acomodar la posible fase relativa en el movimiento de ambos átomos. Reemplazando:

$$\begin{cases} -M\omega_k^2 B_k = -(G + g)B_k + (G + ge^{-ika})A_k \\ -m\omega_k^2 A_k = -(G + g)A_k + (G + ge^{ika})B_k \end{cases}$$

Cadena diatómica

Modelo básico, primeros vecinos

Proponemos nuevamente modos normales

$$u_n(t) = \sum_k A_k e^{i(kx - \omega_k t)} \quad U_n(t) = \sum_k B_k e^{i(kx - \omega_k t)}$$


donde ahora las amplitudes pueden ser complejas, para acomodar la posible fase relativa en el movimiento de ambos átomos. Reemplazando:

$$\begin{cases} -M\omega_k^2 B_k = -(G + g)B_k + (G + ge^{-ika})A_k \\ -m\omega_k^2 A_k = -(G + g)A_k + (G + ge^{ika})B_k \end{cases}$$

Cadena diatómica

Modelo básico, primeros vecinos

Proponemos nuevamente modos normales

$$u_n(t) = \sum_k A_k e^{i(kx - \omega_k t)} \quad U_n(t) = \sum_k B_k e^{i(kx - \omega_k t)}$$

donde ahora las amplitudes pueden ser complejas, para acomodar la posible fase relativa en el movimiento de ambos átomos. Reemplazando:

$$\begin{pmatrix} M\omega_k^2 - (G + g) & G + ge^{-ika} \\ G + ge^{ika} & m\omega_k^2 - (G + g) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_k \\ A_k \end{pmatrix}$$

Cadena diatómica

Modelo básico, primeros vecinos

Proponemos nuevamente modos normales

$$u_n(t) = \sum_k A_k e^{i(kx - \omega_k t)} \quad U_n(t) = \sum_k B_k e^{i(kx - \omega_k t)}$$

donde ahora las amplitudes pueden ser complejas, para acomodar la posible fase relativa en el movimiento de ambos átomos. Reemplazando:

$$\omega_k^2 = \frac{G + g}{2\mu} \pm \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{G + g}{2\mu}\right)^2 - 4 \frac{Gg}{Mn} \sin^2 \left(\frac{ka}{2}\right)}$$

$$\text{con } \mu = \frac{Mm}{M + m}.$$

Cadena diatómica

Modelo básico, solución

Si bien la solución del caso general es un tanto engorroso, puede ser resuelto sin dificultad.

$$\omega_k^2 = \frac{G + g}{2\mu} \pm \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{G + g}{2\mu}\right)^2 - 4 \frac{Gg}{Mn} \sin^2 \left(\frac{ka}{2}\right)}$$

Lo más importante de notar es la existencia de dos soluciones que dan origen a dos ramas en la relación de dispersión. Esto está vinculado al número de grados de libertad: 2 átomos en la base y oscilaciones longitudinales.

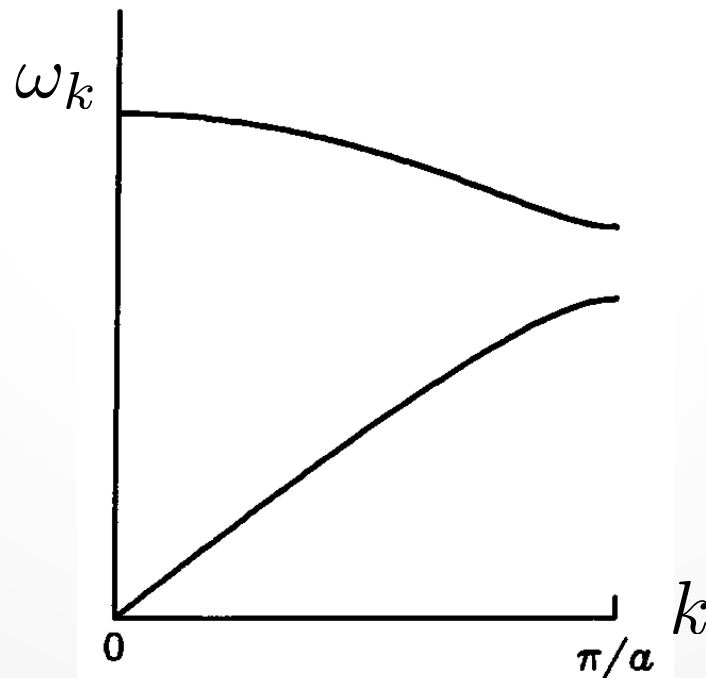
Si hubiéramos considerado las oscilaciones transversales, los grados de libertad serían 6 y así tendríamos seis ramas en la relación de dispersión.

Cadena diatómica

Modelo básico, solución

Si bien la solución del caso general es un tanto engorrosa, puede ser resuelto sin dificultad.

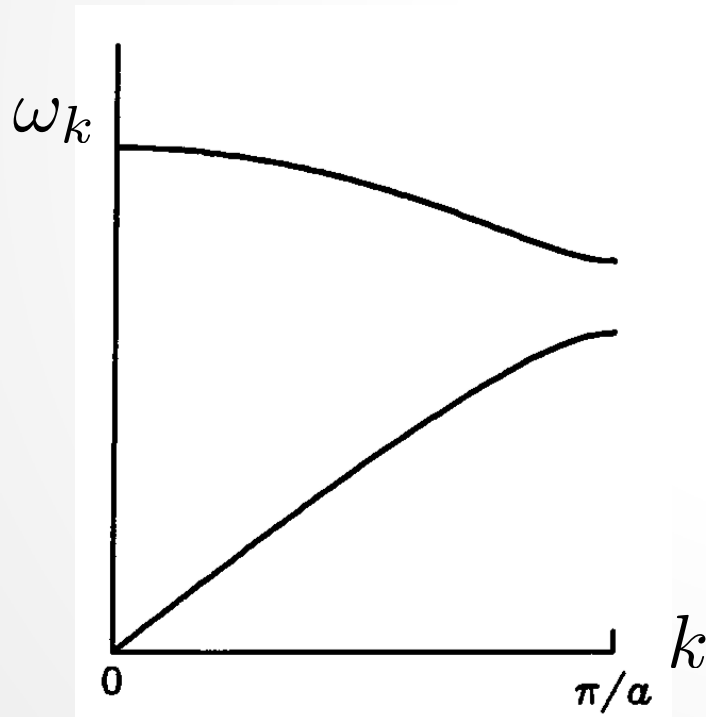
$$\omega_k^2 = \frac{G + g}{2\mu} \pm \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{G + g}{2\mu}\right)^2 - 4\frac{Gg}{Mn} \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)}$$



Cadena diatómica

Modelo básico, solución onda larga

Si tomamos el límite de $k \rightarrow 0$ en la relación de dispersión, podemos aproximar el seno por su argumento y la raíz por el primer término de Taylor relevante. Así encontramos dos soluciones:



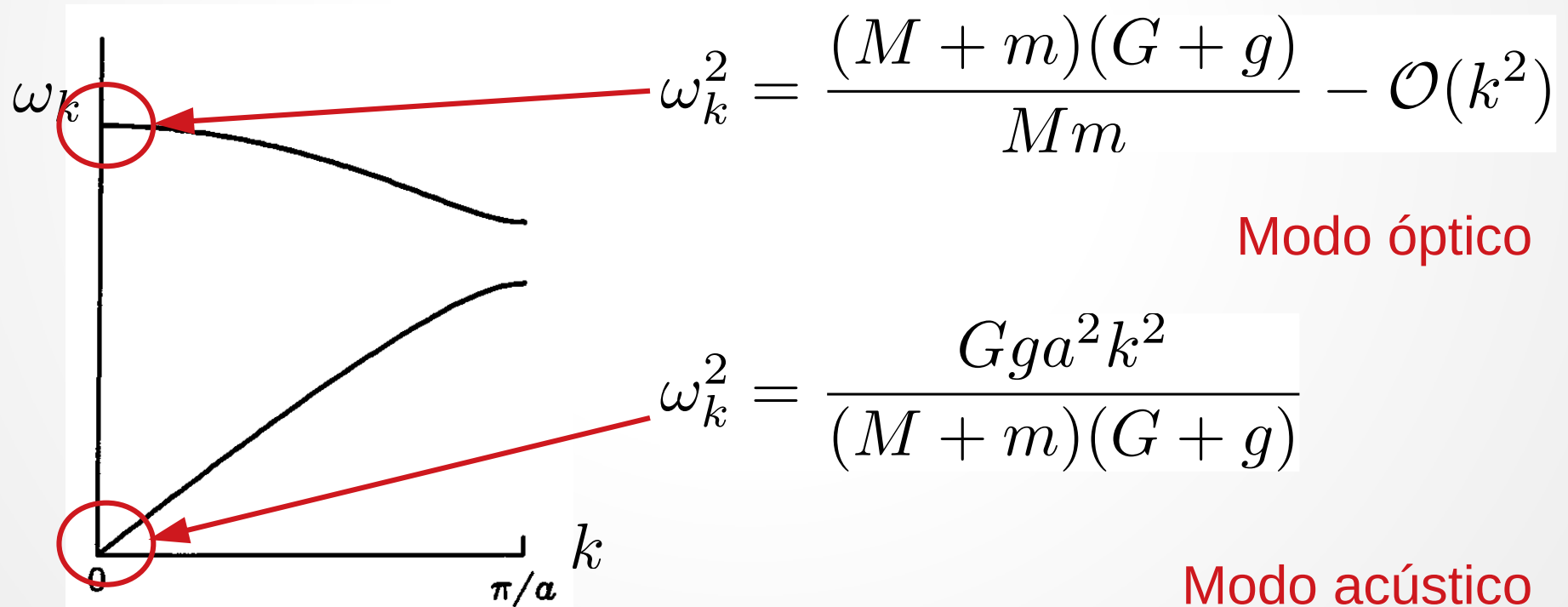
$$\omega_k^2 = \frac{(M + m)(G + g)}{Mm} - \mathcal{O}(k^2)$$

$$\omega_k^2 = \frac{Gga^2k^2}{(M + m)(G + g)}$$

Cadena diatómica

Modelo básico, solución onda larga

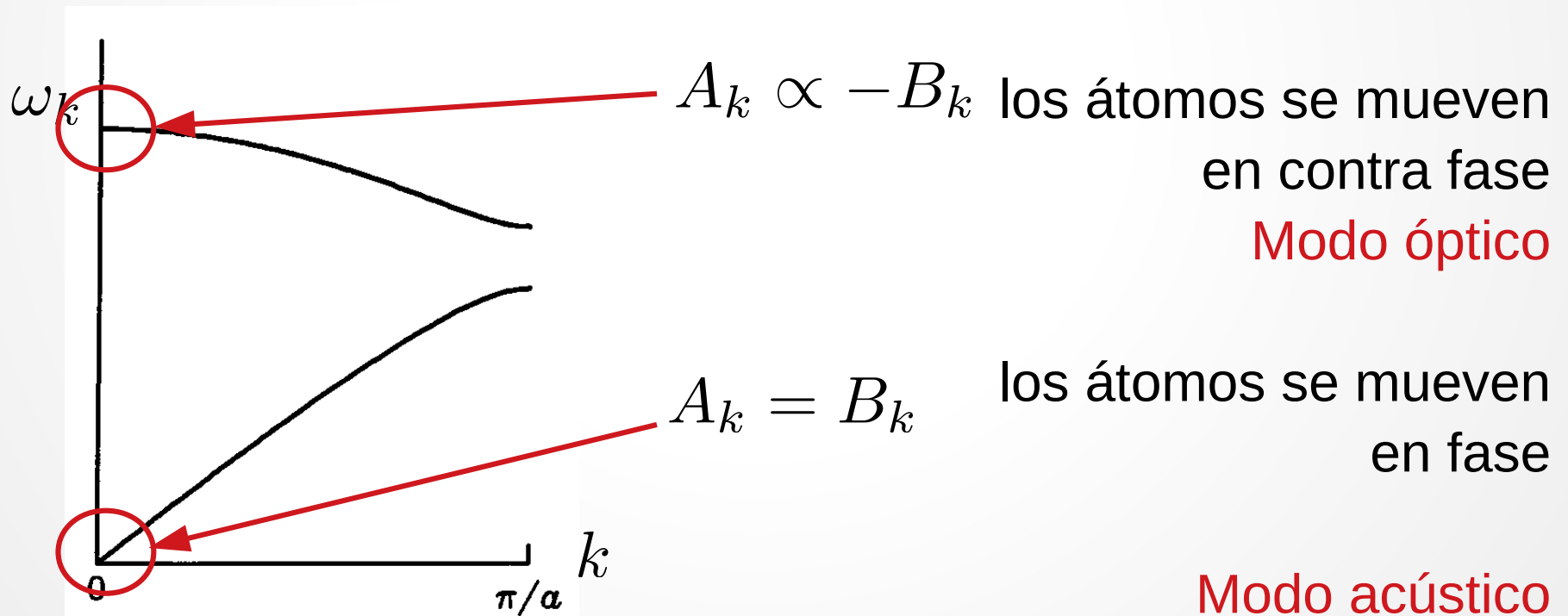
Si tomamos el límite de $k \rightarrow 0$ en la relación de dispersión, podemos aproximar el seno por su argumento y la raíz por el primer término de Taylor relevante. Así encontramos dos soluciones:



Cadena diatómica

Modelo básico, solución onda larga

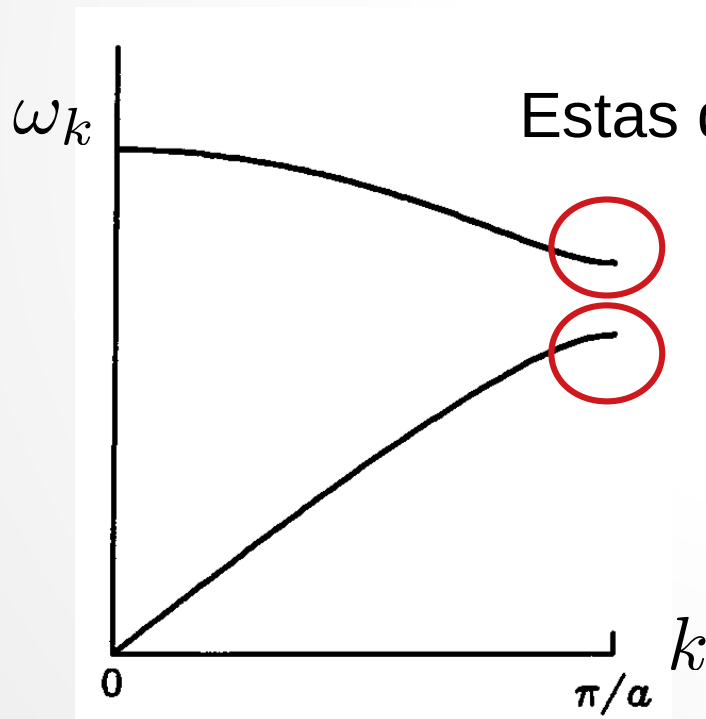
Si tomamos el límite de $k \rightarrow 0$ en la relación de dispersión, podemos aproximar el seno por su argumento y la raíz por el primer término de Taylor relevante. Así encontramos dos soluciones:



Cadena diatómica

Modelo básico, solución onda larga

Si tomamos el límite de $k \rightarrow 0$ en la relación de dispersión, podemos aproximar el seno por su argumento y la raíz por el primer término de Taylor relevante. Así encontramos dos soluciones:



Estas diferencias **pueden mantenerse o no** en los bordes de zona dependiendo de los parámetros del problema.

Caso general

Conexión con lo visto anteriormente

A medida que consideremos situaciones más complejas (materiales en 3D, bases numerosas, etc.) el método elemental de construir las ecuaciones de movimiento se vuelve más y más complicado.

Busquemos por tanto una descripción formal del caso general. Si tenemos p átomos en la base, contando el número de grados de libertad **en 3D, tendremos $3p$ ramas** en la relación de dispersión.

De ellas **3 serán acústicas y $3(p-1)$ ópticas.**

Caso general

Conexión con lo visto anteriormente

Tomemos como ejemplo las ecuaciones en el caso de la cadena diatómica:

$$\begin{pmatrix} M\omega_k^2 - (G + g) & G + ge^{-ika} \\ G + ge^{ika} & m\omega_k^2 - (G + g) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_k \\ A_k \end{pmatrix}$$

Definiendo $E = M^{1/2} B_k$ y $e = m^{1/2} A_k$, las ecuaciones se pueden llevar a la forma:

$$\begin{pmatrix} E \\ e \end{pmatrix} \omega_k^2 = \mathbf{D}(\mathbf{k}) \begin{pmatrix} E \\ e \end{pmatrix}$$

Caso general

Matriz dinámica

Hemos introducido así lo que se conoce como **matriz dinámica**

$$\mathbf{D}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \frac{G+g}{M} & -\frac{G+ge^{-ika}}{(Mm)^{1/2}} \\ -\frac{G+ge^{ika}}{(Mm)^{1/2}} & \frac{G+g}{M} \end{pmatrix}$$

El problema tiene dos soluciones: $\omega_1^2; (E_1, e_1)$
 $\omega_2^2; (E_2, e_2)$

Si las reemplazamos en la ecuación matricial de movimiento

$$\begin{pmatrix} E \\ e \end{pmatrix} \omega_k^2 = \mathbf{D}(\mathbf{k}) \begin{pmatrix} E \\ e \end{pmatrix}$$

Caso general

Matriz dinámica

Obtenemos la relación

$$\mathbf{e} \cdot \Omega = \mathbf{D}(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{e}$$

donde

$$\Omega = \begin{pmatrix} \omega_1^2 & 0 \\ 0 & \omega_2^2 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{e} = \begin{pmatrix} E_1 & E_2 \\ e_1 & e_2 \end{pmatrix}$$

Es evidente entonces que

$$\Omega = \mathbf{e}^{-1} \cdot \mathbf{D}(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{e}$$

los autovalores de la matriz dinámica son los cuadrados de las frecuencias y sus autovectores los desplazamientos de cada modo.

Caso general

Teoría general

Comencemos por definir la energía de la red como la suma sobre todas las interacciones entre pares de átomos

$$W = \frac{1}{2} \sum_{jl; j'l'} \varphi(jl; j'l')$$

donde la suma va sobre el **átomo j -ésimo** en la **l -ésima celda** unidad y la energía de interacción es la correspondiente al par $(jl)_y(j'l')$.

En la aproximación armónica, la energía es

$$E^{\text{harm}} = \frac{1}{2} \sum_{jl; j'l'} \sum_{\alpha\beta} u_{\alpha}(jl) \Phi_{\alpha\beta} u_{\beta}(j'l'); \quad \alpha, \beta = x, y, z.$$

Caso general

Teoría general

En la última expresión, introducimos la matriz de constantes de fuerza

$$\Phi_{\alpha\beta}(jl; j'l') = \frac{\partial^2 W}{\partial u_{\alpha}(jl) \partial u_{\beta}(j'l')}.$$

Aunque válido, normalmente es más sencillo trabajar directamente con las interacciones entre pares.

Caso general

Teoría general

Se puede mostrar que la matriz de constantes de fuerza puede escribirse alternativamente como:

$$\Phi_{\alpha\beta}(jl; j'l') = -\phi_{\alpha\beta}(jl; j'l') + \delta_{jj'}\delta_{ll'} \sum_{j''l''} \phi_{\alpha\beta}(jl; j''l'')$$

donde ahora

$$\phi_{\alpha\beta}(jl; j'l') = \frac{\partial^2 \varphi(jl; j'l')}{\partial u_{\alpha}(jl) \partial u_{\beta}(j'l')}$$

y

$$E = \frac{1}{4} \sum_{jl; j'l'} \sum_{\alpha\beta} [u_{\alpha}(jl) - u_{\alpha}(j'l')] \phi_{\alpha\beta}(jl; j'l') [u_{\beta}(jl) - u_{\beta}(j'l')].$$

Caso general

Teoría general, ecuación de movimiento

La ecuación de movimiento para el j -ésimo átomo en la l -ésima celda es

$$m_j \ddot{\mathbf{u}}(jl, t) = - \sum_{j'l'} \overleftrightarrow{\phi}(jl, j'l') \cdot \mathbf{u}(j'l', t)$$

Proponiendo como siempre soluciones en modos normales

$$\mathbf{u}(jl, t) = \sum_{\mathbf{k}, \nu} \mathbf{U}(j, \mathbf{k}, \nu) \exp(i [\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}(jl) - \omega(\mathbf{k}, \nu)t])$$

donde ν etiqueta los distintos modos (ramas).

Caso general

Teoría general, ecuación de movimiento

La ecuación de movimiento en la formulación de matriz dinámica es

$$\omega^2(\mathbf{k}, \nu) \mathbf{e}(\mathbf{k}, \nu) = \mathbf{D}(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{e}(\mathbf{k}, \nu)$$

donde

$$\mathbf{e}(\mathbf{k}, \nu) = \begin{pmatrix} \sqrt{m_1} U_x(1, \mathbf{k}, \nu) \\ \sqrt{m_1} U_y(1, \mathbf{k}, \nu) \\ \sqrt{m_1} U_z(1, \mathbf{k}, \nu) \\ \sqrt{m_2} U_x(2, \mathbf{k}, \nu) \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \sqrt{m_n} U_z(n, \mathbf{k}, \nu) \end{pmatrix}$$

Caso general

Teoría general, ecuación de movimiento

La matriz dinámica, por otra parte es

$$D_{\alpha\beta}(jj', \mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{m_j m_{j'}}} \sum_{l'} \Phi_{\alpha\beta}(j0, j'l') \exp [i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_{l'} - \mathbf{R}_0)]$$

donde \mathbf{R}_0 es la posición de una celda unidad arbitraria en la red de Bravais.

Los autovalores de esta matriz serán las frecuencias al cuadrado de los modos normales y sus autovectores, los *vectores de polarización*, dan cuenta de los desplazamientos de los modos normales.

Caso general

Teoría general, ecuación de movimiento

Propiedades importantes:

$\mathbf{D}(\mathbf{k}) = \mathbf{D}(\mathbf{k})^\dagger$ la matriz dinámica es hermítica.

Sus autovectores están normalizados

$$\mathbf{e}(\mathbf{k})^T \cdot \mathbf{e}(\mathbf{k})^\star = \mathbf{e}(\mathbf{k})^T \cdot \mathbf{e}(-\mathbf{k}) = 1$$

y los modos normales son ortogonales

$$\mathbf{e}(\mathbf{k}, \nu)^T \cdot \mathbf{e}(-\mathbf{k}, \nu') = \delta_{\nu, \nu'}$$

Si el cristal es una red de Bravais (sin base) hay más simetrías (ver Ashcroft).

Caso general

Teoría general, energía de pares

Utilizando el formalismo desarrollado, cualquier problema de matriz dinámica se reduce a obtener las constantes

$$\phi_{\alpha\beta}(jl; j'l') = \frac{\partial^2 \varphi(jl; j'l')}{\partial u_{\alpha}(jl) \partial u_{\beta}(j'l')}$$

y reemplazarlas en

$$\Phi_{\alpha\beta}(jl; j'l') = -\phi_{\alpha\beta}(jl; j'l') + \delta_{jj'} \delta_{ll'} \sum_{j''l''} \phi_{\alpha\beta}(jl; j''l'')$$

para escribir la matriz dinámica. Luego solo resta obtener el sistema de autovalores y autovectores.

Caso general

Teoría general, energía de pares

Veamos como se obtiene la interacción entre pares en el caso general.

Consideremos entonces dos “átomos” A y B interactuando con una fuerza elástica de constante C y que oscilan alrededor de sus posiciones de equilibrio O y \mathbf{d}_0 .

La energía de interacción es

$$\varphi(B; A) = \frac{C}{2} (d - d_0)^2 ; \quad d = |\mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A| \quad \text{y} \quad d_0 = |\mathbf{d}_0| .$$

Caso general

Teoría general, energía de pares

Veamos como se obtiene la interacción entre pares en el caso general.

Evaluemos las derivadas:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial r_{\beta}^A} = C (|\mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A| - d_0) \frac{\partial |\mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A|}{\partial r_{\beta}^A}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial r_{\alpha}^B \partial r_{\beta}^A} &= C \frac{\partial |\mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A|}{\partial r_{\alpha}^B} \frac{\partial |\mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A|}{\partial r_{\beta}^A} + \\ &\quad + C (|\mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A| - d_0) \frac{\partial^2 |\mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A|}{\partial r_{\alpha}^B \partial r_{\beta}^A} \end{aligned}$$

Vemos que el segundo término se anula en equilibrio.

Caso general

Teoría general, energía de pares

Veamos como se obtiene la interacción entre pares en el caso general.

Por lo tanto:

$$\left. \frac{\partial^2 \varphi}{\partial r_{\alpha}^B \partial r_{\beta}^A} \right|_{d=d_0} = C \frac{r_{\alpha}^B - r_{\alpha}^A}{|\mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A|} \frac{r_{\beta}^B - r_{\beta}^A}{|\mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A|} \bigg|_{d=d_0}$$

Caso general

Teoría general, energía de pares

Veamos como se obtiene la interacción entre pares en el caso general.

Por ejemplo, si la interacción es en la dirección x.

$$\varphi(B; A) = \frac{C}{2} (|x_B - x_A| - d_0)^2$$

$$\Rightarrow \overleftrightarrow{\phi}(B; A) = \begin{pmatrix} C & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Si es en y ó z es análogo.

Caso general

Teoría general, energía de pares

Veamos como se obtiene la interacción entre pares en el caso general.

Por ejemplo, si la interacción está en el primer cuadrante:

$$\varphi(B; A) = \frac{C}{2} \left(\sqrt{(x_B - x_A)^2 + (y_B - y_A)^2} - d_0 \right)^2$$

$$\Rightarrow \overleftrightarrow{\phi}(B; A) = C \begin{pmatrix} \left(\frac{d_0^x}{d_0} \right)^2 & \frac{d_0^x}{d_0} \frac{d_0^y}{d_0} & 0 \\ \frac{d_0^x}{d_0} \frac{d_0^y}{d_0} & \left(\frac{d_0^y}{d_0} \right)^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Ejemplos

Ejemplo: red rectangular sin base

Resolvamos un ejemplo sencillo. Red rectangular 2D, sin base, con interacciones a primeros vecinos y constante de fuerza C_1 en x y C_2 en y .

Las energías de interacción de pares son $\varphi(0; \pm a\hat{x})$ y $\varphi(0; \pm b\hat{y})$

La matriz de fuerzas, en este caso es

$$\Phi_{\alpha\beta}(0; l') = -\phi_{\alpha\beta}(0; l') + \delta_{0l'} \sum_{l''} \phi_{\alpha\beta}(0; l'')$$

Ejemplos

Ejemplo: red rectangular sin base

Resolvamos un ejemplo sencillo. Red rectangular 2D, sin base, con interacciones a primeros vecinos y constante de fuerza C_1 en x y C_2 en y .

Comencemos con el caso $l' = 0$

$$\Phi_{\alpha\beta}(0; 0) = -\phi_{\alpha\beta}(0; 0) + \sum_{l''=\pm a\hat{x}, \pm b\hat{y}} \phi_{\alpha\beta}(0; l'')$$

$$\overleftrightarrow{\Phi}(0; 0) = \begin{pmatrix} 2C_1 & 0 \\ 0 & 2C_2 \end{pmatrix}$$

Ejemplos

Ejemplo: red rectangular sin base

Resolvamos un ejemplo sencillo. Red rectangular 2D, sin base, con interacciones a primeros vecinos y constante de fuerza C_1 en x y C_2 en y .

Sigamos con $l' = \pm a\hat{x}, \pm b\hat{y}$

$$\Phi_{\alpha\beta}(0; l') = -\phi_{\alpha\beta}(0; l')$$

$$\overleftrightarrow{\Phi}(0; \pm a\hat{x}) = \begin{pmatrix} -C_1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad \overleftrightarrow{\Phi}(0; \pm b\hat{y}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -C_2 \end{pmatrix}$$

Ejemplos

Ejemplo: red rectangular sin base

Resolvamos un ejemplo sencillo. Red rectangular 2D, sin base, con interacciones a primeros vecinos y constante de fuerza C_1 en x y C_2 en y .

Reemplazando en la definición de matriz dinámica

$$D(\mathbf{k}) = \frac{1}{m} \left\{ \Phi(0; 0) + \Phi(0; a\hat{x})e^{ik_x a} + \Phi(0; -a\hat{x})e^{-ik_x a} + \right. \\ \left. + \Phi(0; b\hat{y})e^{ik_y b} + \Phi(0; -b\hat{y})e^{-ik_y b} \right\}$$

$$\Rightarrow D(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \frac{2C_1}{m} (1 - \cos(k_x a)) & 0 \\ 0 & \frac{2C_2}{m} (1 - \cos(k_y b)) \end{pmatrix}.$$

Alcance

Tratamiento clásico

Como veremos en la clase siguiente, el tratamiento clásico de las vibraciones de la red no es suficiente como para capturar las propiedades exhibidas por los sólidos.

Es necesario “cuantizar” estos grados de libertad e introducir una nueva “partícula”, el fonón.

Enterrado en el procedimiento se encuentra el mecanismo estándar utilizado en las teorías de campo: la introducción de un campo continuo que luego se cuantiza. Las excitaciones del mismo son las partículas: en nuestro caso los fonones.

Todas las partículas fundamentales de la naturaleza surgen de la cuantización de algún campo subyacente.

Fin de la clase

¡Muchas gracias!