

Oscilaciones del cristal

Teoría cuántica de las oscilaciones armónicas del cristal

Prof. Alberto Camjayi

Introducción

La descripción clásica no alcanza

Pese a que en la aproximación armónica las relaciones de dispersión cuánticas y clásica coinciden, las propiedades estadísticas son claramente diferentes.

Dos de los problemas claves del fin de siglo XX fueron los calores específicos de los sólidos y la radiación de cuerpo negro.

En ambos casos el camino hacia una solución se dio cuando se cuantizaron los grados de libertad involucrados. Planck introdujo su fórmula para “ajustar” las observaciones en el espectro del cuerpo negro y Einstein tomó sus ideas como postulado y las extendió a la descripción de los sólidos.

Introducción

Aproximación armónica

El punto de partida es el resultado clásico.

$$E = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{R}\mathbf{R}'} \sum_{jj'} \mathbf{u}_{\mathbf{R}j} \Phi_{\mathbf{R}j;\mathbf{R}'j'} \mathbf{u}_{\mathbf{R}'j'}$$

Transformando Fourier (¿pueden relacionar esta expresión con alguna de la clase anterior?)

$$\mathbf{u}_{\mathbf{R}j} = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{Nm_j}} \mathbf{u}_{\mathbf{k}j}(t) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}$$

Introducción

Aproximación armónica

Reemplazando en la energía:

$$E = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{R}\mathbf{R}'} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{jj'} \mathbf{u}_{\mathbf{k}j} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \frac{\Phi_{\mathbf{R}-\mathbf{R}';j;0j'}}{\sqrt{m_j m_{j'}}} \mathbf{u}_{\mathbf{k}'j'} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}'}$$

$$= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{jj'} \mathbf{u}_{\mathbf{k}j} \left(\sum_{\mathbf{R}} \frac{\Phi_{\mathbf{R}j;0j'}}{\sqrt{m_j m_{j'}}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \right) \mathbf{u}_{\mathbf{k}'j'} \left(\sum_{\mathbf{R}'} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{k}')\cdot\mathbf{R}'} \right)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{jj'} \mathbf{u}_{\mathbf{k}j} \left(\sum_{\mathbf{R}} \frac{\Phi_{\mathbf{R}j;0j'}}{\sqrt{m_j m_{j'}}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \right) \mathbf{u}_{-\mathbf{k}j'} \underbrace{N \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{k}'}}_{}$$

$$\implies E = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left(\sum_{jj'} \mathbf{u}_{\mathbf{k}j} \mathbf{D}_{jj'}(\mathbf{k}) \mathbf{u}_{-\mathbf{k}j'} \right)$$

Introducción

Aproximación armónica

Diagonalizando la matriz dinámica, se obtiene la energía potencial elástica en su forma diagonal:

$$E = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \nu} \mathbf{u}_{\mathbf{k}\nu} \omega_{\mathbf{k}\nu}^2 \mathbf{u}_{-\mathbf{k}\nu}$$

donde $\mathbf{u}_{\mathbf{k}\nu} = \sum_j \mathbf{e}_{\mathbf{k}\nu}^j \cdot \mathbf{u}_{\mathbf{k}j}$.

El problema se reduce a osciladores desacoplados.

Descripción cuántica

Cuantización

Promoviendo las variables de momento y posición al estatus de operadores e introduciendo los operadores de creación y destrucción, el hamiltoniano que obtenemos es el de pN osciladores independientes:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}\nu} \left(\hat{a}_{\mathbf{k}\nu}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}\nu} + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_\nu(\mathbf{k}) \equiv \sum_{\mathbf{k}\nu} \left(\hat{n}_{\mathbf{k}\nu} + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_\nu(\mathbf{k})$$

donde $[\hat{a}_{\mathbf{k}\nu}, \hat{a}_{\mathbf{k}\nu}^\dagger] = 1$.

Los fonones, los *cuantos* de vibración del cristal, son bosones libres.

Propiedades térmicas

Calor específico

A partir de la formulación cuántica, solo resta utilizar la mecánica estadística para evaluar sus consecuencias. La función de partición es

$$Z = \sum_{\{n_{\mathbf{k}\nu}\}} e^{-\beta E\{n_{\mathbf{k}\nu}\}}$$

donde la suma es sobre todas las configuraciones posibles. Como

$$\sum_{\{n_{\mathbf{k}\nu}\}} e^{-\beta E\{n_{\mathbf{k}\nu}\}} = \sum_{\{n_{\mathbf{k}\nu}\}} e^{-\beta \sum_{\{n_{\mathbf{k}\nu}\}} (n_{\mathbf{k}\nu} + \frac{1}{2}) \hbar \omega_{\mathbf{k}\nu}}$$

Propiedades térmicas

Calor específico

A partir de la formulación cuántica, solo resta utilizar la mecánica estadística para evaluar sus consecuencias. La función de partición es

$$Z = \sum_{\{n_{\mathbf{k}\nu}\}} e^{-\beta E\{n_{\mathbf{k}\nu}\}}$$

donde la suma es sobre todas las configuraciones posibles. Como

$$\sum_{\{n_{\mathbf{k}\nu}\}} e^{-\beta E\{n_{\mathbf{k}\nu}\}} = \prod_{\mathbf{k}\nu} \left(e^{-\beta \frac{1}{2} \hbar \omega_{\nu}(\mathbf{k})} + e^{-\beta \frac{3}{2} \hbar \omega_{\nu}(\mathbf{k})} + \dots \right)$$

Propiedades térmicas

Calor específico

A partir de la formulación cuántica, solo resta utilizar la mecánica estadística para evaluar sus consecuencias. La función de partición es

$$Z = \sum_{\{n_{\mathbf{k}\nu}\}} e^{-\beta E\{n_{\mathbf{k}\nu}\}}$$

donde la suma es sobre todas las configuraciones posibles. Como

$$\sum_{\{n_{\mathbf{k}\nu}\}} e^{-\beta E\{n_{\mathbf{k}\nu}\}} = \prod_{\mathbf{k}\nu} \frac{e^{-\frac{\beta}{2} \hbar \omega_{\nu}(\mathbf{k})}}{1 - e^{-\beta \hbar \omega_{\nu}(\mathbf{k})}}$$

Propiedades térmicas

Calor específico

A partir de la formulación cuántica, solo resta utilizar la mecánica estadística para evaluar sus consecuencias. Ahora podemos calcular la densidad de energía

$$u = -\frac{\partial}{\partial \beta} \frac{1}{V} \ln Z = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\nu} \hbar\omega_{\nu}(\mathbf{k}) \left[\frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_{\nu}(\mathbf{k})} - 1} + \frac{1}{2} \right].$$

Enseguida reconocemos el valor medio de la ocupación

$$n_{\nu}(\mathbf{k}) = \langle n_{\mathbf{k}\nu} \rangle = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_{\nu}(\mathbf{k})} - 1}$$

característico de los bosones.

Propiedades térmicas

Calor específico

A partir de la formulación cuántica, solo resta utilizar la mecánica estadística para evaluar sus consecuencias. Restaurando la constante de energía (red estática):

$$u = u_{\text{eq}} + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\nu} \frac{\hbar\omega_{\nu}(\mathbf{k})}{2} + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\nu} \frac{\hbar\omega_{\nu}(\mathbf{k})}{e^{\beta\hbar\omega_{\nu}(\mathbf{k})} - 1}$$

Propiedades térmicas

Calor específico

A partir de la formulación cuántica, solo resta utilizar la mecánica estadística para evaluar sus consecuencias. Restaurando la constante de energía (red estática):

$$u = u_{\text{eq}} + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\nu} \frac{\hbar\omega_{\nu}(\mathbf{k})}{2} + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\nu} \frac{\hbar\omega_{\nu}(\mathbf{k})}{e^{\beta\hbar\omega_{\nu}(\mathbf{k})} - 1}$$

Red estática
(clásico)

Fluctuaciones de punto cero

Propiedades térmicas

Calor específico

A partir de la formulación cuántica, solo resta utilizar la mecánica estadística para evaluar sus consecuencias. Restaurando la constante de energía (red estática):

$$u = u_{\text{eq}} + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\nu} \frac{\hbar\omega_{\nu}(\mathbf{k})}{2} + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\nu} \frac{\hbar\omega_{\nu}(\mathbf{k})}{e^{\beta\hbar\omega_{\nu}(\mathbf{k})} - 1}$$

$$c_V = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\nu} \frac{\partial}{\partial T} \frac{\hbar\omega_{\nu}(\mathbf{k})}{e^{\beta\hbar\omega_{\nu}(\mathbf{k})} - 1}$$

Propiedades térmicas

Calor específico, límite clásico

A altas temperaturas donde $\beta\hbar\omega \equiv x \ll 1$, podemos expandir la exponencial:

$$\frac{1}{e^x - 1} = \frac{1}{x + \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{6}x^3 + \dots} = \frac{1}{x} \left[1 - \frac{x}{2} + \frac{x^2}{12} + \mathcal{O}(x^3) \right]$$

A primer orden no nulo:

$$c_V = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\nu} \frac{\partial}{\partial T} (k_B T) = \frac{1}{V} 3pNk_B = 3nk_B$$

se obtiene el resultado de Dulong-Petit.

Propiedades térmicas

Calor específico, límite de baja temperatura

A bajas temperaturas donde $\beta\hbar \rightarrow \infty$, podemos estimar el calor específico haciendo las siguientes aproximaciones:

Pasamos de la sumatoria a la integral

$$c_V = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\nu} \frac{\partial}{\partial T} \frac{\hbar\omega_\nu(\mathbf{k})}{e^{\beta\hbar\omega_\nu(\mathbf{k})} - 1} \rightarrow \frac{\partial}{\partial T} \sum_\nu \int_{1\text{BZ}} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{\hbar\omega_\nu(\mathbf{k})}{e^{\beta\hbar\omega_\nu(\mathbf{k})} - 1}$$

Como el integrando va exponencialmente a cero, podemos extender el área de integración sin alterar significativamente el resultado

$$c_V = \frac{\partial}{\partial T} \sum_\nu \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{\hbar\omega_\nu(\mathbf{k})}{e^{\beta\hbar\omega_\nu(\mathbf{k})} - 1}$$

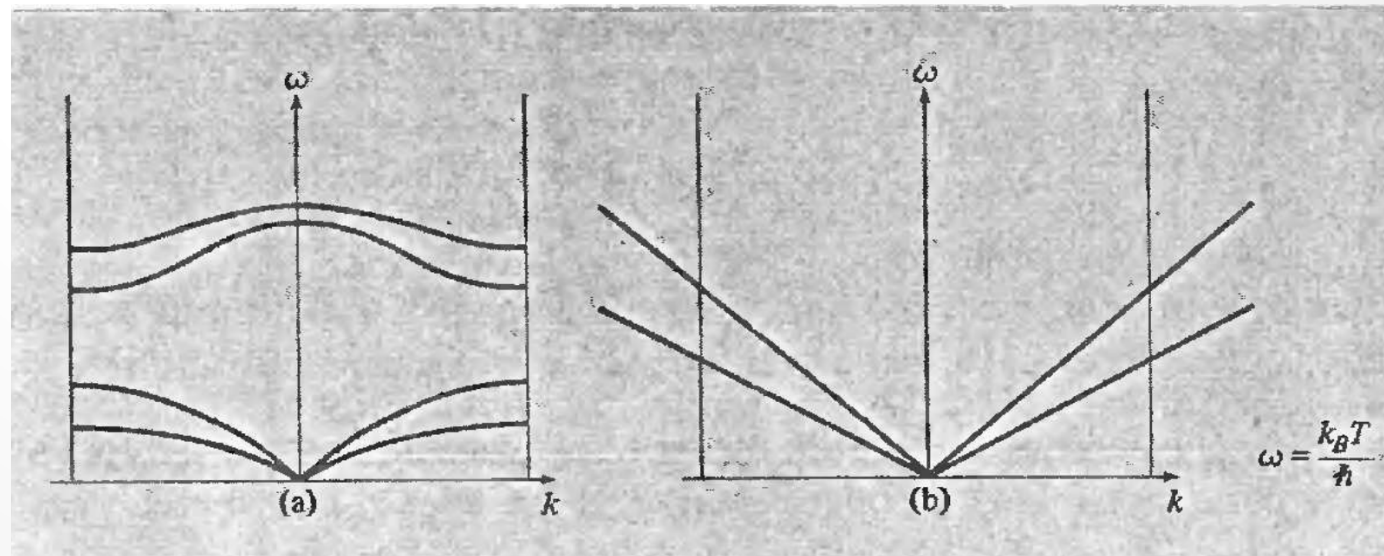
Propiedades térmicas

Calor específico, límite de baja temperatura

A bajas temperaturas donde $\beta\hbar \rightarrow \infty$, podemos estimar el calor específico haciendo las siguientes aproximaciones:

Como $\beta\hbar \rightarrow \infty$, solo los modos acústicos de baja energía (dispersión lineal) contribuyen a la integral. Así **despreciamos los modos ópticos** y aproximamos los acústicos como:

$$\omega_\nu(\mathbf{k}) \approx c_\nu(\hat{\mathbf{k}})k$$



Propiedades térmicas

Calor específico, límite de baja temperatura

A bajas temperaturas donde $\beta\hbar \rightarrow \infty$, podemos estimar el calor específico haciendo las siguientes aproximaciones:

$$c_V \approx \frac{\partial}{\partial T} \sum_{\nu \in \text{acus.}} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{\hbar c_\nu(\hat{\mathbf{k}})k}{e^{\beta\hbar c_\nu(\hat{\mathbf{k}})k} - 1}.$$

Pasando a esféricas

$$c_V \approx \frac{\partial}{\partial T} \sum_{\nu \in \text{acus.}} \int_0^\infty \frac{dk}{(2\pi)^3} \int d\Omega \frac{\hbar c_\nu(\hat{\mathbf{k}})k^3}{e^{\beta\hbar c_\nu(\hat{\mathbf{k}})k} - 1}.$$

Propiedades térmicas

Calor específico, límite de baja temperatura

Definiendo la variable $x = \beta \hbar c_\nu(\hat{\mathbf{k}})k$, la integral se puede llevar a la forma

$$c_V \approx \frac{\partial}{\partial T} \int_0^\infty \frac{dx}{2\pi^2} \frac{x^3}{e^x - 1} \frac{3}{\beta^4 \hbar^3} \frac{1}{3} \sum_{\nu \in \text{acus.}} \int \frac{d\Omega}{4\pi} \frac{1}{c_\nu(\hat{\mathbf{k}})}$$

Definiendo el promedio inverso del cubo de las velocidades del sonido a longitud de onda larga

$$\frac{1}{c_s^3} = \frac{1}{3} \sum_{\nu \in \text{acus.}} \int \frac{d\Omega}{4\pi} \frac{1}{c_\nu(\hat{\mathbf{k}})}$$

Propiedades térmicas

Calor específico, límite de baja temperatura

Finalmente obtenemos

$$c_V \approx \frac{\partial}{\partial T} \frac{(k_B T)^4}{(\hbar c_s)^3} \frac{3}{2\pi^2} \int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \frac{\partial}{\partial T} \frac{\pi^2}{10} \frac{(k_B T)^4}{(\hbar c_s)^3}$$

$$c_V \approx \frac{2\pi^2}{5} k_B \left(\frac{k_B T}{\hbar c_s} \right)^3$$

Propiedades térmicas

Calor específico, rango intermedio: interpolación

Entre las aproximaciones discutidas, hay un rango grande de temperaturas donde el cálculo debe ser realizado de manera numérica. Esto es posible si se conocen las relaciones de dispersión.

Históricamente, hubo dos interpolaciones sencillas debidas a Debye y Einstein, que todavía se utilizan como métodos interpolativos o de ajuste.

Propiedades térmicas

Calor específico, rango intermedio: interpolación

Debye

- Simplifica el espectro a solo tres ramas con dispersión lineal, idénticas entre ellas $\omega = v_s k$ (típicamente $v_s = c_s$).
- Reemplaza la 1BZ e integra sobre una esfera de radio k_D , cuyo volumen contiene exactamente pN estados (pN es el número de iones del cristal).

$$\frac{(2\pi)^3}{V} \times pN = \frac{4}{3}\pi k_D^3 \implies n = \frac{k_D^3}{6\pi^2}$$

Propiedades térmicas

Calor específico, rango intermedio: interpolación

Debye

Como resultado, la fórmula de Debye es

$$c_V = \frac{\partial}{\partial T} \frac{3\hbar v_s}{2\pi^2} \int_0^{k_D} \frac{k^3 dk}{e^{\beta\hbar v_s k} - 1} =$$
$$= \frac{3\hbar v_s}{2\pi^2} \frac{\hbar v_s}{k_B T^2} \int_0^{k_D} \frac{k^4 e^{\beta\hbar v_s k}}{(e^{\beta\hbar v_s k} - 1)^2} dk$$

Definiendo la frecuencia y la temperatura de Debye.

$$\omega_D = v_s k_D; \quad k_B \Theta_D = \hbar \omega_D$$

Propiedades térmicas

Calor específico, rango intermedio: interpolación

Debye

El resultado puede ponerse enteramente en función de los parámetros

$$c_V = 9nk_B \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3 \int_0^{\Theta_D/T} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx; \quad x = \beta \hbar v_s k.$$

La temperatura de Debye es una medida de la temperatura debajo de la cual la contribución fonónica se “congela”. A temperaturas mayores que la de Debye los grados de libertad fonónicos están activos. Típicamente $\Theta_D \approx 10^2$ K.

Propiedades térmicas

Calor específico, rango intermedio: interpolación

Debye

¿Cómo se elige la temperatura de Debye?

1) Pidiendo que coincida a baja temperatura con el resultado exacto.

$$c_V^{\text{Debye}}(T \rightarrow 0) = \frac{12\pi^4}{5} n k_B \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3$$

Ajustando los datos a baja temperatura con una cúbica en T , se determina su valor.

Propiedades térmicas

Calor específico, rango intermedio: interpolación

Debye

¿Cómo se elige la temperatura de Debye?

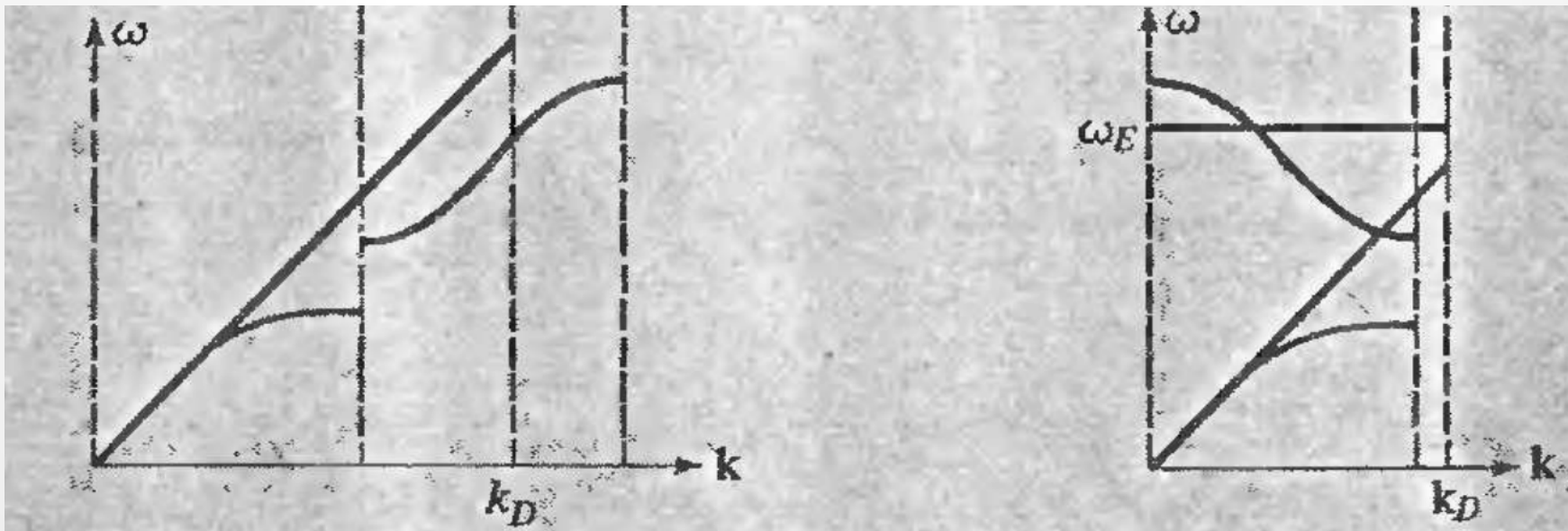
- 1) Pidiendo que coincida a baja temperatura con el resultado exacto.
- 2) Habitualmente, se toma la temperatura de Debye como una función de ajuste: $\Theta_D = \Theta_D(T)$. Si bien no está justificado, es una práctica usual.

Propiedades térmicas

Calor específico, rango intermedio: interpolación

Einstein

Para obtener una mejor representación de las ramas ópticas, se puede utilizar el modelo de Einstein. Así, combinando el modelo de Debye para las ramas acústicas y el de Einstein para las ópticas, se puede mejorar la descripción.

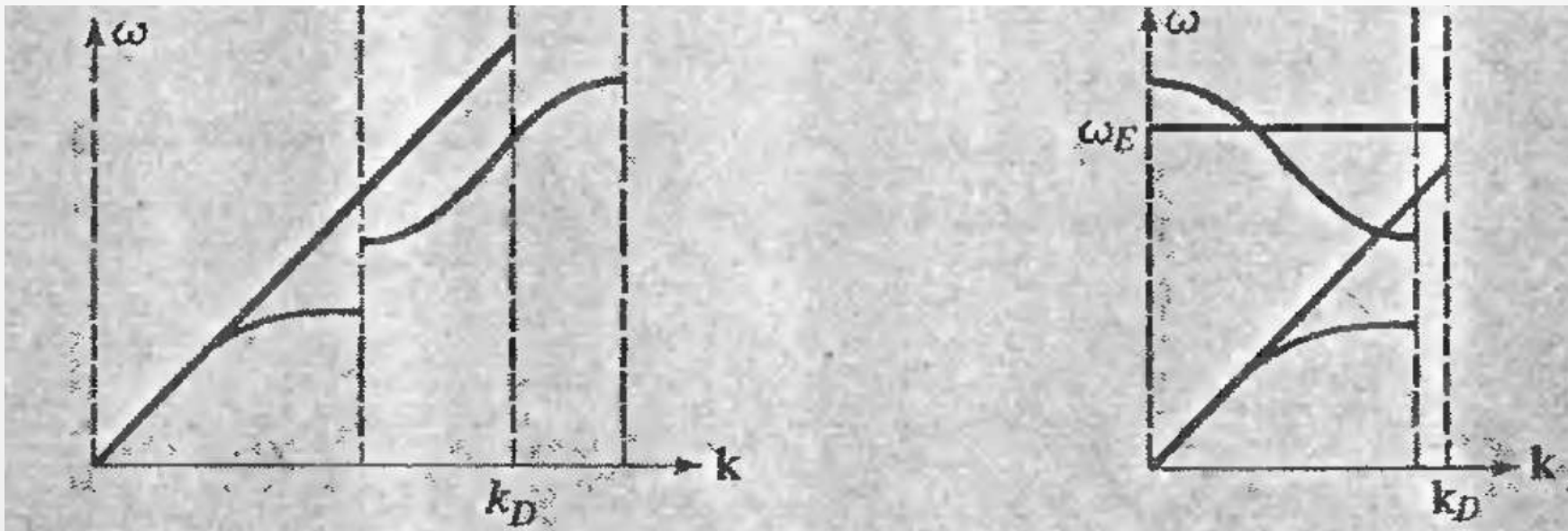


Propiedades térmicas

Calor específico, rango intermedio: interpolación

Einstein

En este modelo, **todas** las ramas ópticas se aproximan por una relación de dispersión constante de frecuencia ω_E .



Propiedades térmicas

Calor específico, rango intermedio: interpolación

Einstein

Las acústicas se tratan con Debye

$$c_V^{\text{acus.}} = 9nk_B \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3 \int_0^{\Theta_D/T} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx$$

solo que ahora la densidad considera solo el número de celdas primitivas (para evitar contar dos veces).

$$\frac{(2\pi)^3}{V} \times N = \frac{4}{3} \pi k_D^3$$

Propiedades térmicas

Calor específico, rango intermedio: interpolación

Einstein

Las ópticas, en la aproximación de Einstein, contribuyen a la energía con el término

$$\frac{n\hbar\omega_E}{e^{\beta\hbar\omega_E} - 1}.$$

Por lo tanto, si tenemos $3(p-1)$ ramas ópticas, su contribución será

$$c_V^{\text{óptico}} = 3(p-1)nk_B \frac{(\beta\hbar\omega_E)^2 e^{\beta\hbar\omega_E}}{(e^{\beta\hbar\omega_E} - 1)^2}.$$

Propiedades térmicas

Calor específico, rango intermedio: interpolación

Einstein

El calor específico de Einstein contribuye con el término $3(p - 1)nk_B$ al resultado de Dulong-Petit a alta temperatura. A baja temperatura, como corresponde para los modos ópticos, su contribución es despreciable (cae exponencialmente). La temperatura característica, que separa ambos regímenes, es la temperatura de Einstein

$$k_B \Theta_E = \hbar \omega_E$$

Propiedades térmicas

Calor específico y densidades de estado

De forma análoga a como hicimos con los electrones, es posible introducir la densidad de estados de fonones.

$$c_V = \frac{\partial}{\partial T} \sum_{\nu} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{\hbar\omega_{\nu}(\mathbf{k})}{e^{\beta\hbar\omega_{\nu}(\mathbf{k})} - 1} = \frac{\partial}{\partial T} \int d\omega g(\omega) \frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}$$

Comparando ambos lados de la igualdad

$$g(\omega) = \sum_{\nu} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \delta(\omega - \omega_{\nu}(\mathbf{k}))$$

Propiedades térmicas

Calor específico y densidades de estado

Por ejemplo, en la aproximación de Debye, tenemos

$$g_{\text{Debye}}(\omega) = 3 \int_{\text{D}} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \delta(\omega - ck) = 3 \int_0^{k_D} \frac{dk}{2\pi^2} \delta(\omega - ck)$$

$$g_{\text{Debye}}(\omega) = \begin{cases} \frac{3}{2\pi^2} \frac{\omega^2}{c^3}; & \omega < \omega_D \\ 0; & \omega > \omega_D \end{cases}$$

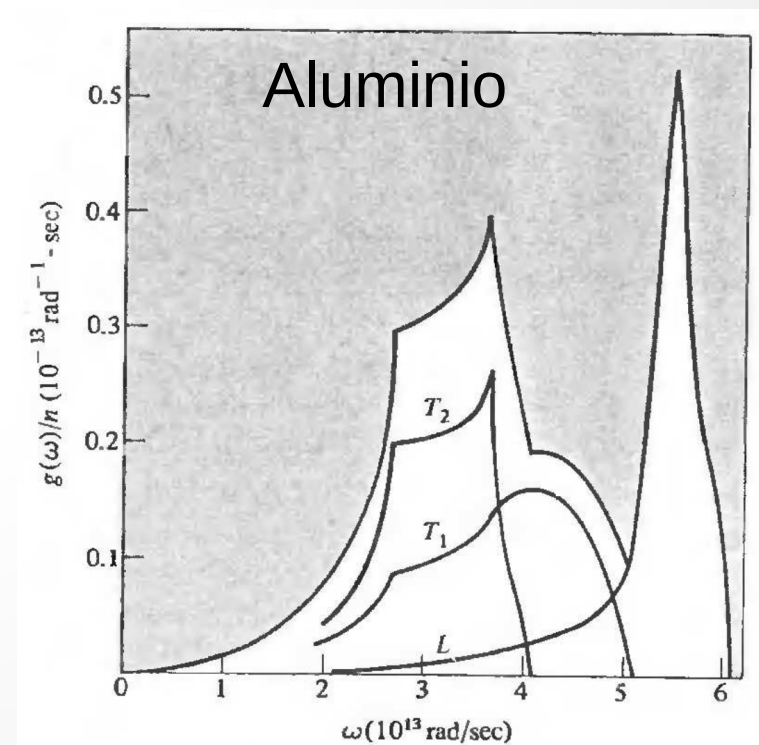
Propiedades térmicas

Calor específico y densidades de estado

Por ejemplo, en la aproximación de Debye, tenemos

$$g_{\text{Debye}}(\omega) = 3 \int_{\text{D}} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \delta(\omega - ck) = 3 \int_0^{k_D} \frac{dk}{2\pi^2} \delta(\omega - ck)$$

$$g_{\text{Debye}}(\omega) = \begin{cases} \frac{3}{2\pi^2} \frac{\omega^2}{c^3}; & \omega < \omega_D \\ 0; & \omega > \omega_D \end{cases}$$



Midiendo los fonones

Interacción con luz y neutrones

Además de interactuar con los estados electrónicos, la radiación electromagnética puede interactuar con los fonones.

Esta interacción ocurre de dos maneras: por absorción de luz (en el infrarrojo) o por scattering inelástico (en el visible).

Ambos procesos son diferentes, cumplen distintas reglas de selección y constituyen métodos complementarios.

Los neutrones por otra parte, solo interactúan por procesos inelásticos.

Midiendo los fonones

Absorción infrarroja

En este proceso resonante, un fotón es absorbido y un fonón es creado en el material.

Este proceso puede ocurrir en cualquier material con carácter iónico. El mismo está asociado al momento dipolar creado en el modo fonónico por el desplazamiento relativo de los iones cargados.

El fonón asociado a esta absorción debe ser necesariamente óptico.

Midiendo los fonones

Absorción infrarroja

Se deben conservar energía y momento (c es la velocidad de la luz).

Energía: $\omega_{\text{fonón}} = ck_{\text{fotón}}$

Momento: $\mathbf{k}_{\text{fotón}} = \mathbf{k}_{\text{fonón}} + \mathbf{K}$

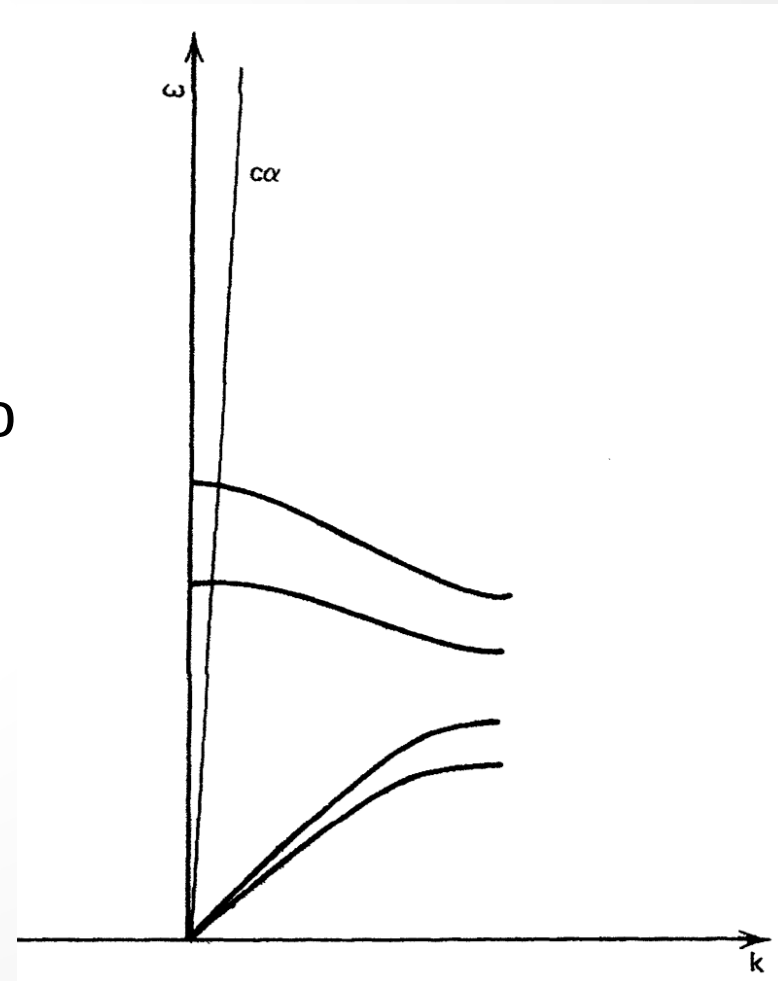
Dado que la velocidad de la luz es mucho mayor que la del sonido $\mathbf{K} = 0$.

En infrarrojo:

$$\omega_{\text{fonón}} \approx 10^{13} - 10^{14} \text{ Hz}$$

$$\rightarrow k_{\text{fotón}} \approx 10^3 \text{ cm}^{-1}$$

$$\rightarrow k_{\text{fonón}} \ll \pi/a \approx 10^8 \text{ cm}^{-1}$$



Midiendo los fonones

Dispersión inelástica

Los procesos de scattering con fotones o neutrones son completamente análogos. La diferencia es la energía involucrada, siendo la de los fotones mucho mayor.

Si aumentamos la energía de los fotones más allá del infrarrojo, la energía transferida a los fonones es tan pequeña que detectarla en el fotón dispersado es complicado.

Para fijar ideas, comenzaremos con el scattering de neutrones.

Midiendo los fonones

Dispersión inelástica de neutrones

Dos conservaciones determinan las reglas de selección: conservación de la energía y del momento cristalino.

La conservación de la energía es un principio fundamental que no hace falta aclarar.

La conservación del momento cristalino es consecuencia del potencial periódico. Los neutrones interactúan con los núcleos, que forman un arreglo periódico (la red de Bravais más la base). Por el teorema de Noether, asociada a esta simetría hay una cantidad conservada: **el momento cristalino**.

Midiendo los fonones

Dispersión inelástica de neutrones

Conservaciones. Las variables primadas corresponden a los estados finales.

$$\frac{p'^2}{2M} - \frac{p^2}{2M} = - \sum_{\mathbf{k}\nu} \hbar\omega_{\nu}(\mathbf{k})(n'_{\mathbf{k}\nu} - n_{\mathbf{k}\nu})$$

$$\mathbf{p}' - \mathbf{p} = - \sum_{\mathbf{k}\nu} \hbar\mathbf{k}(n'_{\mathbf{k}\nu} - n_{\mathbf{k}\nu}) + \hbar\mathbf{K}$$

Inicialmente el neutrón tiene un momento \mathbf{p} y hay una distribución $n_{\mathbf{k}\nu}$ de fonones. Luego del scattering ambos cambian (variables primadas).

Midiendo los fonones

Dispersión inelástica de neutrones

Scattering con cero fonones. En este caso, el estado final del cristal es idéntico al inicial. El scattering es *elástico*.

$$\frac{p'^2}{2M} - \frac{p^2}{2M} = 0 \implies q' = q \quad (p = \hbar q)$$

$$\mathbf{p}' - \mathbf{p} = \hbar \mathbf{K} \implies \mathbf{q}' = \mathbf{q} + \mathbf{K}$$

El resultado es exactamente igual al obtenido por von Laue en el scattering de Rx. Obviamente son iguales porque ambos procesos son elásticos.

Midiendo los fonones

Dispersión inelástica de neutrones

Scattering con un fonón. En este caso, el estado final del cristal difiere en un fonón del inicial. El scattering es *inelástico*.

$$\frac{p'^2}{2M} = \frac{p^2}{2M} \pm \hbar\omega_\nu(\mathbf{k})$$

$$\mathbf{p}' = \mathbf{p} \pm \hbar\mathbf{k} + \hbar\mathbf{K}$$

Midiendo los fonones

Dispersión inelástica de neutrones

Scattering con un fonón. En este caso, el estado final del cristal difiere en un fonón del inicial. El scattering es *inelástico*.

$$\frac{p'^2}{2M} = \frac{p^2}{2M} \pm \hbar\omega_\nu(\mathbf{k})$$

$$\mathbf{p}' = \mathbf{p} \pm \hbar\mathbf{k} + \hbar\mathbf{K}$$

Absorción/emisión de un fonón

Estos resultados pueden ponerse en función de la transferencia de momento $\mathbf{p}' - \mathbf{p}$. Además el momento cristalino puede absorberse como un corrimiento ya que $\omega_{\mathbf{k}+\mathbf{K}\nu} = \omega_{\mathbf{k}\nu}$.

Midiendo los fonones

Dispersión inelástica de neutrones

Scattering con un fonón. En este caso, el estado final del cristal difiere en un fonón del inicial. El scattering es *inelástico*.

$$\frac{p'^2}{2M} = \frac{p^2}{2M} + \hbar\omega_\nu \left(\frac{\mathbf{p}' - \mathbf{p}}{\hbar} \right) \quad \text{Fonón absorbido}$$

$$\frac{p'^2}{2M} = \frac{p^2}{2M} - \hbar\omega_\nu \left(\frac{\mathbf{p} - \mathbf{p}'}{\hbar} \right) \quad \text{Fonón emitido}$$

En un experimento, midiendo la energía y la dirección del neutrón saliente, podemos obtener la energía y vector de onda del fonón involucrado. Obtenemos así un punto en la relación de dispersión.

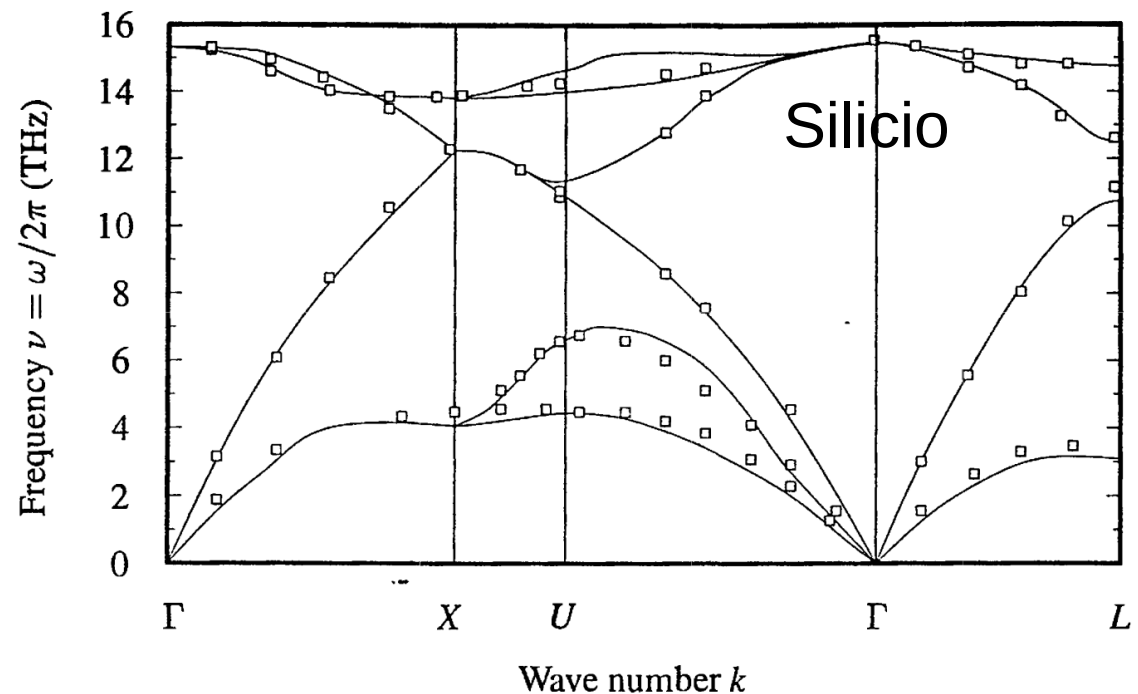
Midiendo los fonones

Dispersión inelástica de neutrones

Scattering con un fonón. En este caso, el estado final del cristal difiere en un fonón del inicial. El scattering es *inelástico*.

En un experimento, midiendo la energía y la dirección del neutrón saliente, podemos obtener la energía y vector de onda del fonón involucrado.

Obtenemos así un punto en la relación de dispersión.



Midiendo los fonones

Dispersión inelástica de neutrones

Scattering con dos fonones. En este caso, el estado final del cristal difiere en dos fonones del inicial.

Veamos la absorción de dos fonones:

$$\frac{p'^2}{2M} = \frac{p^2}{2M} + \hbar\omega_\nu(\mathbf{k}) + \hbar\omega_{\nu'}(\mathbf{k}')$$

$$\mathbf{p}' = \mathbf{p} + \hbar\mathbf{k} + \hbar\mathbf{k}' + \hbar\mathbf{K}$$

Midiendo los fonones

Dispersión inelástica de neutrones

Scattering con dos fonones. En este caso, el estado final del cristal difiere en dos fonones del inicial.

Veamos la absorción de dos fonones. Reduciendo las ecuaciones

$$\frac{p'^2}{2M} = \frac{p^2}{2M} + \hbar\omega_\nu(\mathbf{k}) + \hbar\omega_{\nu'} \left(\frac{\mathbf{p}' - \mathbf{p}}{\hbar} - \mathbf{k} \right)$$

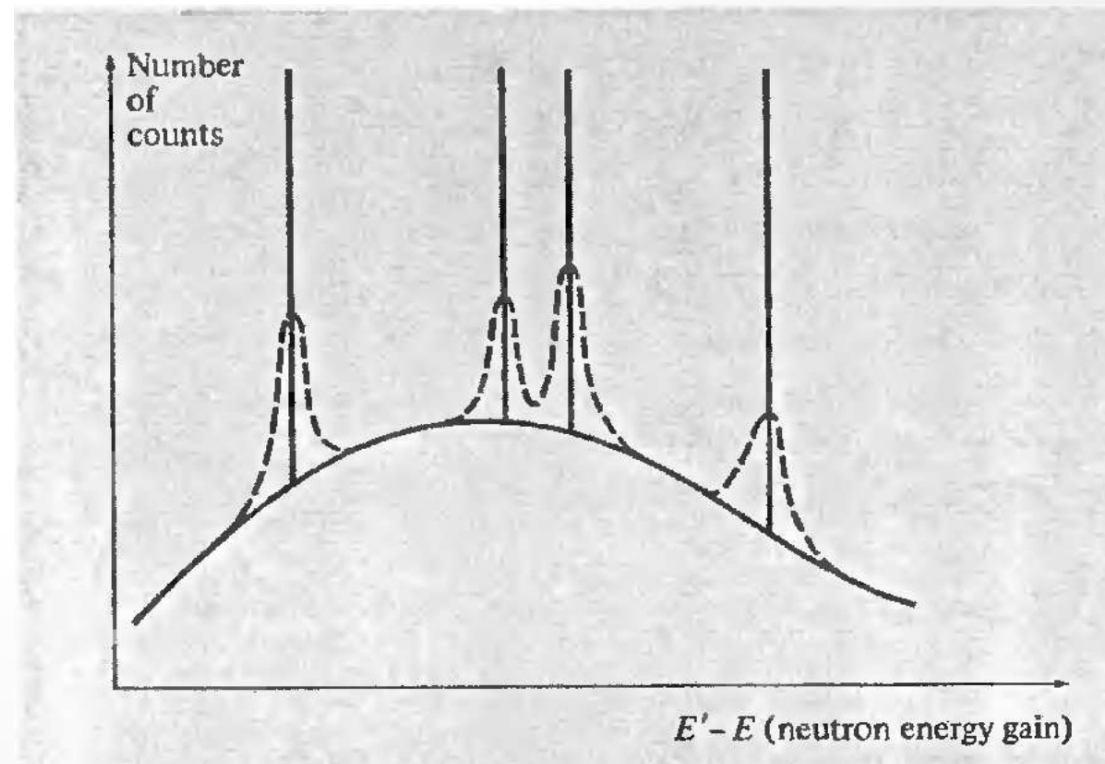
Como vemos, hay un continuo de energías en cada dirección donde midamos el neutrón saliente. El número de conservaciones es inferior al número de incógnitas.

Midiendo los fonones

Dispersión inelástica de neutrones

Scattering con dos fonones. En este caso, el estado final del cristal difiere en dos fonones del inicial.

Como vemos, hay un continuo de energías en cada dirección donde midamos el neutrón saliente.



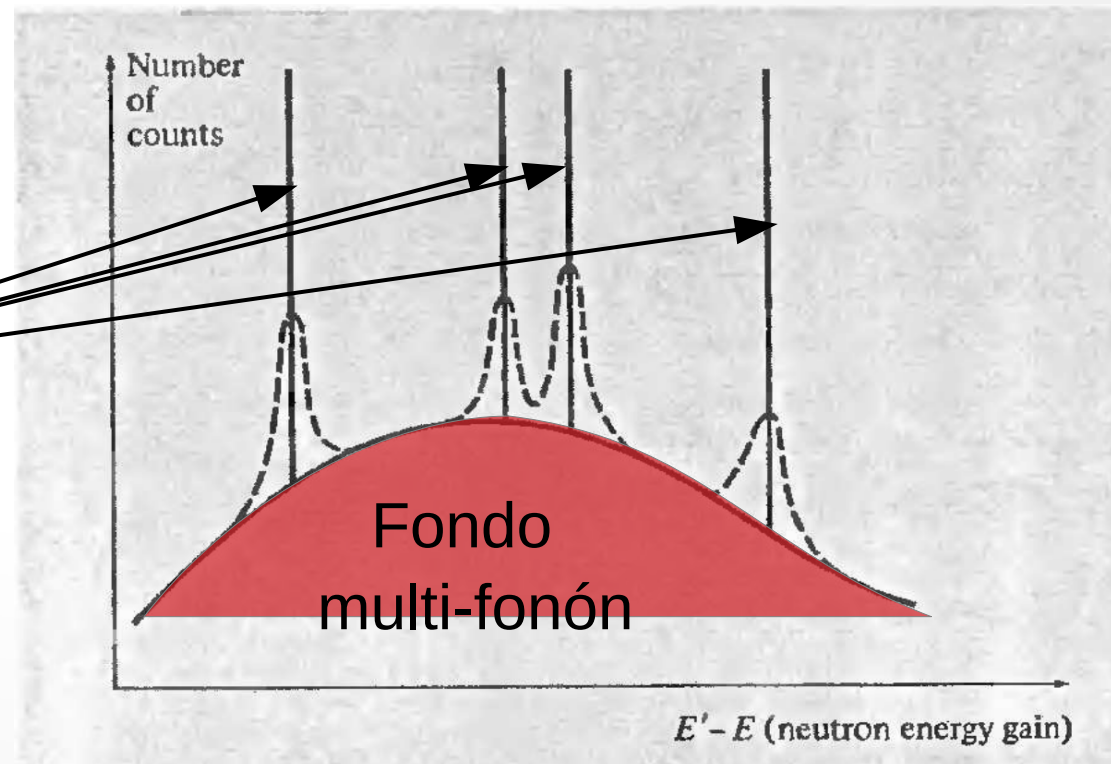
Midiendo los fonones

Dispersión inelástica de neutrones

Scattering con dos fonones. En este caso, el estado final del cristal difiere en dos fonones del inicial.

Como vemos, hay un continuo de energías en cada dirección donde midamos el neutrón saliente.

Picos de procesos de un fonón



Midiendo los fonones

Dispersión Raman

Es posible, utilizando métodos interferométricos, medir las diferencias de energía en fotones ópticos.

Como vimos anteriormente, los vectores de onda de los fotones son pequeños comparados con la 1BZ y, por lo tanto, estas técnicas solo pueden dar información acerca de los fonones en la cercanía de $\mathbf{k} = 0$.

Estos procesos se denominan *scattering de Brillouin* si involucra fonones acústicos y *scattering de Raman* en el caso de fonones ópticos.

Midiendo los fonones

Dispersión Raman

Conservación en el caso de scattering de un fonón.

$$\hbar\omega' = \hbar\omega \pm \hbar\omega_{\nu}(\mathbf{k})$$

$$n\mathbf{q}' = n\mathbf{q} \pm \mathbf{k} \quad n: \text{índice de refracción}$$

Absorción: se conoce como componente *anti-Stokes*

Emisión: se conoce como componente *Stokes*



Midiendo los fonones

Dispersión Raman

Conservación en el caso de scattering de un fonón.

$$\hbar\omega' = \hbar\omega \pm \hbar\omega_{\nu}(\mathbf{k})$$

$$n\mathbf{q}' = n\mathbf{q} \pm \mathbf{k} \quad n: \text{índice de refracción}$$

Como el cambio en el vector de onda del fotón es muy pequeño, se pueden relacionar la magnitud del vector de onda del fonón con el ángulo de scattering y la frecuencia del fotón:

$$k = 2nq \sin \frac{\theta}{2} = 2 \frac{n\omega}{c} \sin \frac{\theta}{2} \quad (\text{Raman})$$

Midiendo los fonones

Dispersión Raman

Conservación en el caso de scattering de un fonón.

$$\hbar\omega' = \hbar\omega \pm \hbar\omega_\nu(\mathbf{k})$$

$$n\mathbf{q}' = n\mathbf{q} \pm \mathbf{k} \quad n: \text{índice de refracción}$$

Como el cambio en el vector de onda del fotón es muy pequeño, se pueden relacionar la magnitud del vector de onda del fonón con el ángulo de scattering y la frecuencia del fotón. En el caso de un fonón acústico, se halla una relación para la velocidad del sonido:

$$c_\nu(\hat{\mathbf{k}}) = \frac{\Delta\omega}{2\omega} \frac{c}{n} \csc\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (\text{Brillouin})$$

Fin de la clase

¡Muchas gracias!