

Estructura de la Materia 2

Clase 5 - Teoría

Docentes

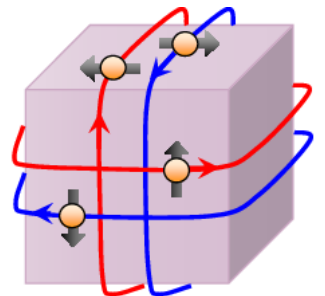
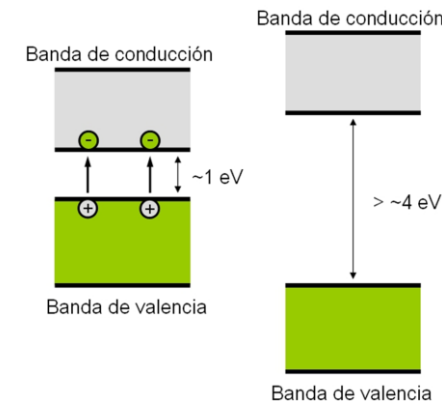
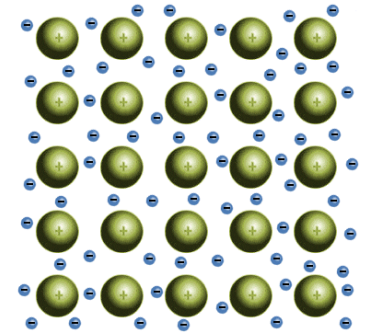
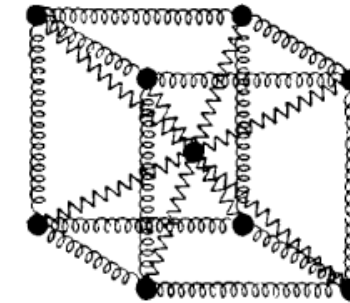
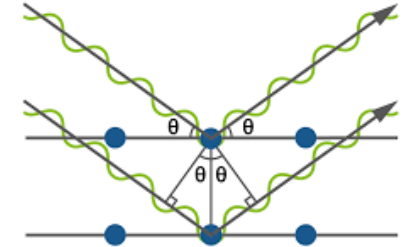
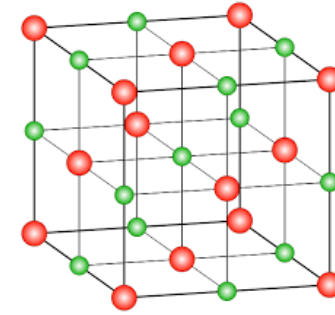
Gustavo Grinblat, Andrea Barral, Franco Mayo, Alejandra Fernández

Departamento de Física, FCEN, UBA – Segundo Cuatrimestre, 2022

Web: <http://materias.df.uba.ar/edlm2a2022c2>

Programa de la materia

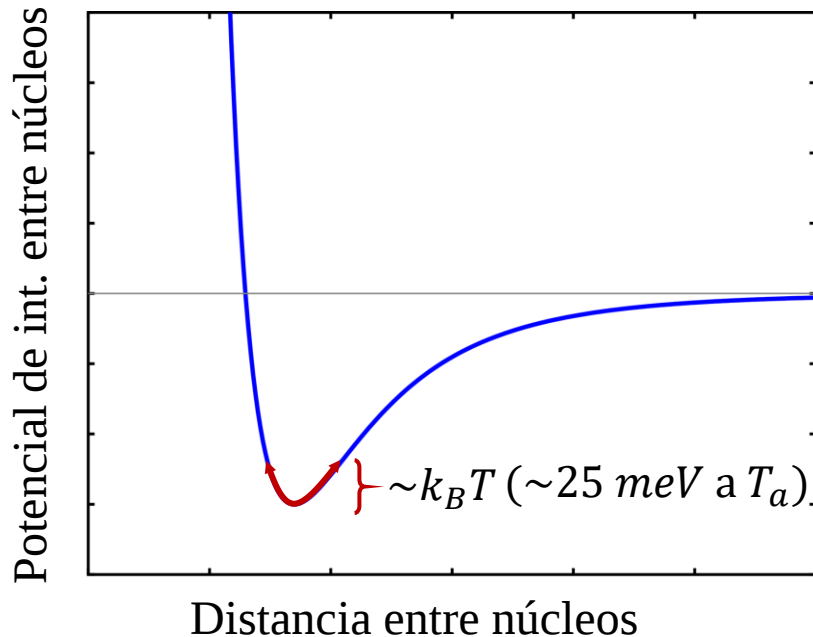
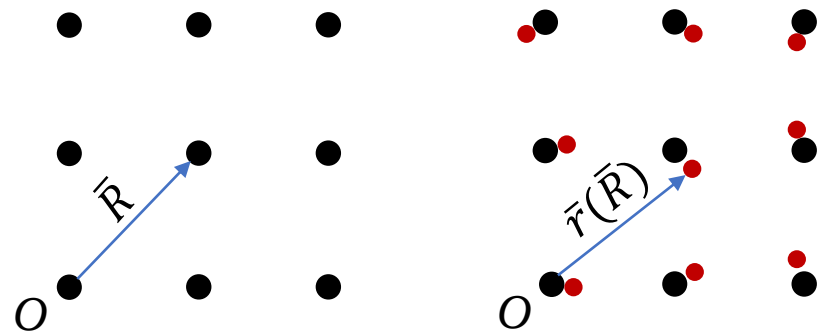
- Red cristalina, red recíproca y difracción de rayos X ✓
- Clasificación de los sólidos y energía de cohesión ✓
- Vibraciones, fonones y propiedades térmicas
- Electrones en sólidos (potencial periódico)
- Semiconductores y juntura semiconductor
- Magnetismo en sólidos
- Introducción a los aisladores topológicos



Modos vibracionales

Posición de los núcleos en un cristal real

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



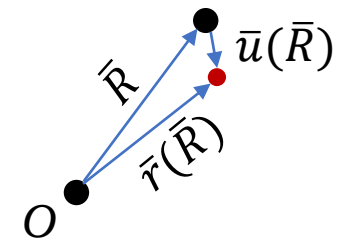
$$\bar{r}(\bar{R}, t) = \bar{R} + \bar{u}(\bar{R}, t)$$

- **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)

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

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

$$U = \frac{1}{2} \sum_{RR'} \phi(R - R' + u(R) - u(R')) = \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{RR'} \phi(R - R')}_{U_{eq}} + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{RR'} \phi'(R - R')(u(R) - u(R'))}_{=0} + \frac{1}{2} \sum_{RR'} [\quad]$$

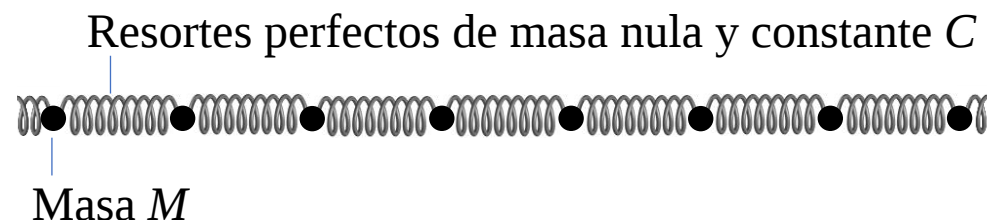
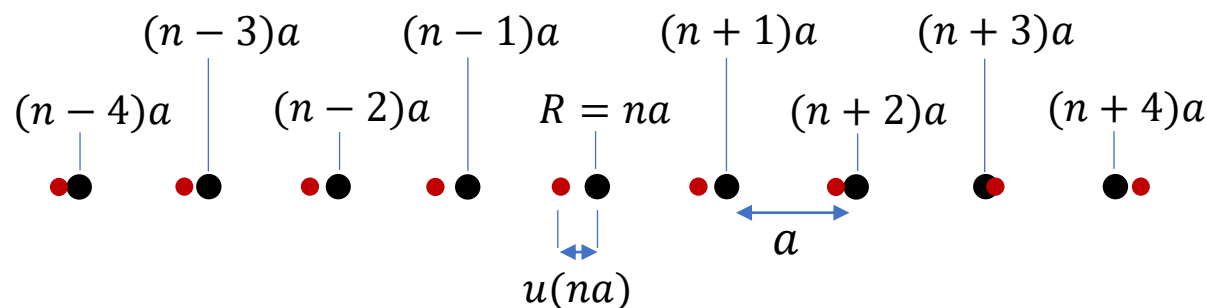
$$U = U_{eq} + \frac{1}{4} \sum_{RR'} \phi''(R - R')(u(R) - u(R'))^2$$

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

$\phi''(R - R')$ $\longrightarrow$ Constantes de fuerza determinadas por la curvatura del potencial de interacción.

Modos vibracionales: Cadena unidimensional

Modos normales de una RB unidimensional



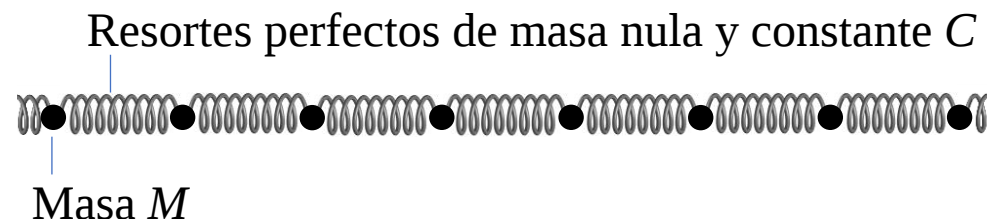
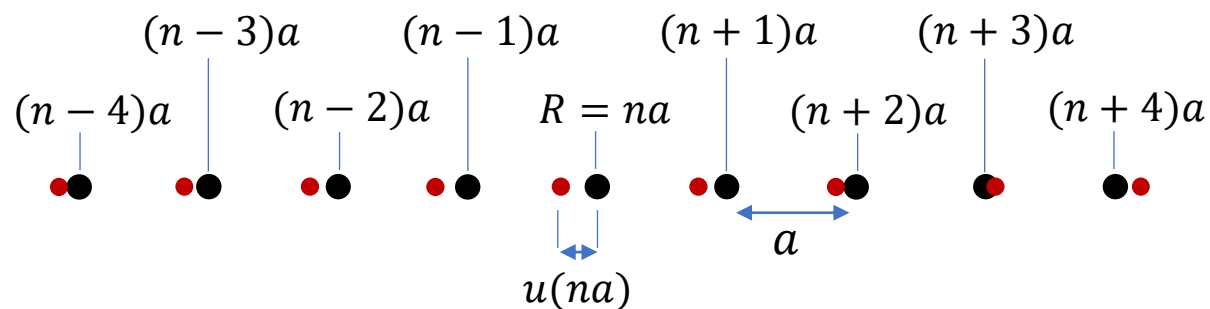
Interacción a primeros vecinos: $U_a = \frac{1}{4} \sum_{RR'} \phi''(R - R')(u(R) - u(R'))^2 = \frac{1}{2} \underbrace{\phi''(a)}_C \sum_i [u(ia) - u([i + 1]a)]^2$

Ecuaciones de movimiento

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

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: $u([N + 1]a) = u(a)$; $u(0) = u(Na)$

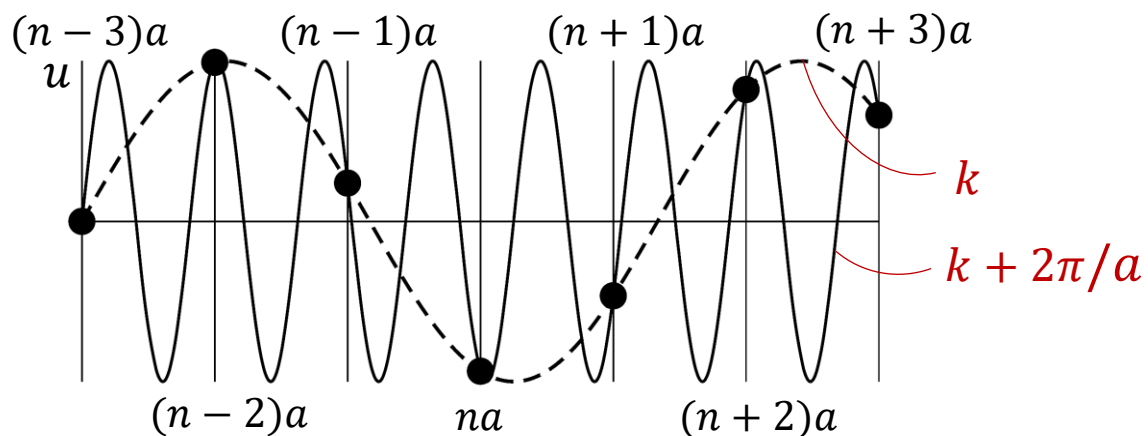
Buscamos soluciones de la forma: $u(na, t) = \epsilon e^{i(kna - \omega t)} \rightarrow e^{ikNa} = 1 \rightarrow k = \frac{2\pi m}{a N}$, m entero

Como desplazar a k en $2\pi/a$ no altera el valor de $u(na) \rightarrow$ 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

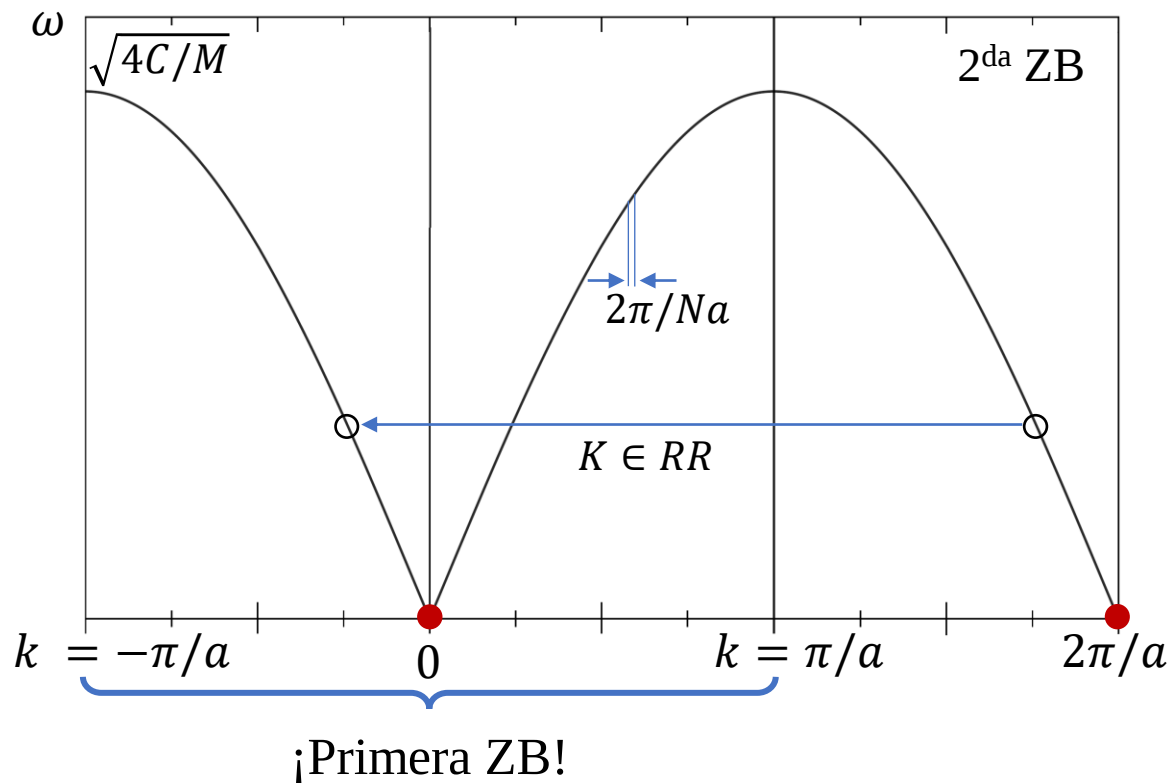
$$\begin{cases} M\ddot{u}(na) = -C[2u(na) - u([n-1]a) - u([n+1]a)] \\ u(na, t) = \epsilon e^{i(kna - \omega t)} \end{cases}$$

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

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

Modos vibracionales: Cadena unidimensional

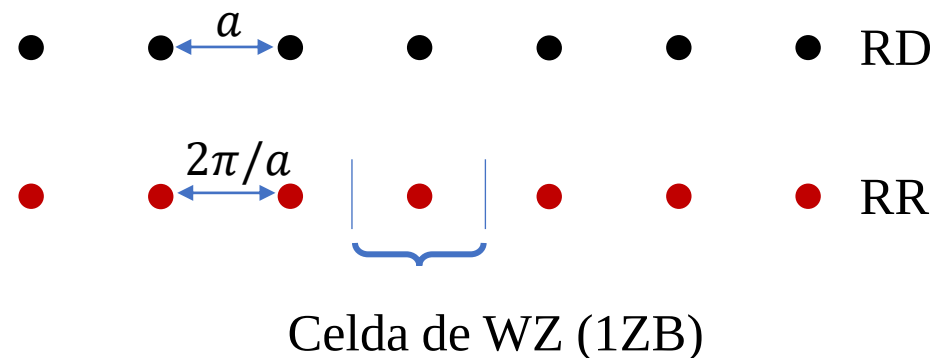
Modos normales de una RB unidimensional: Cadena finita



¡Primera ZB!

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

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



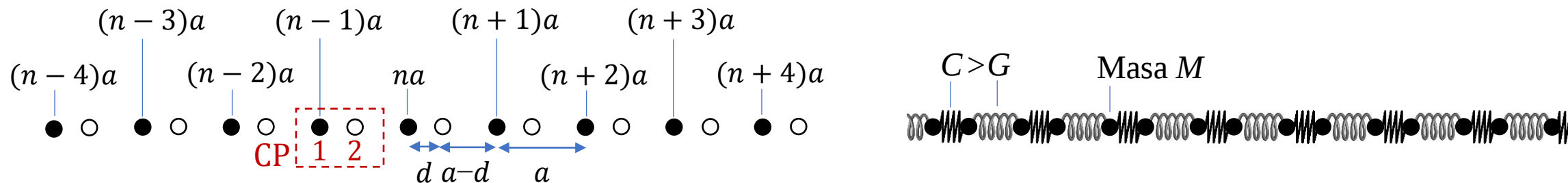
Casos límites

- $k \ll \pi/a \rightarrow \omega(k) = \underbrace{a\sqrt{C/M}}_{\text{Velocidad de fase}} |k|$
 $\text{Relación de dispersión de tipo sonido/luz } (\omega = ck).$
- $k = \pm\pi/a \rightarrow v_g = 0$

$$= \underbrace{c}_{\text{Velocidad de fase}} = \underbrace{v_g}_{\text{Velocidad de grupo}} = \partial\omega/\partial k$$

Modos vibracionales: Cadena unidimensional con base

Modos normales de una red unidimensional con una base (átomos iguales)



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

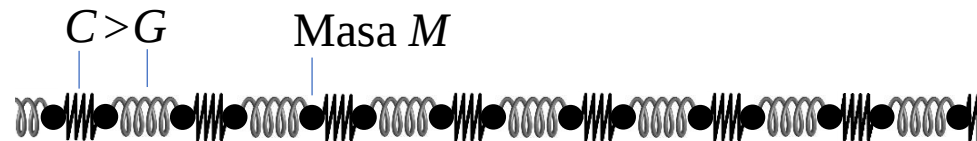
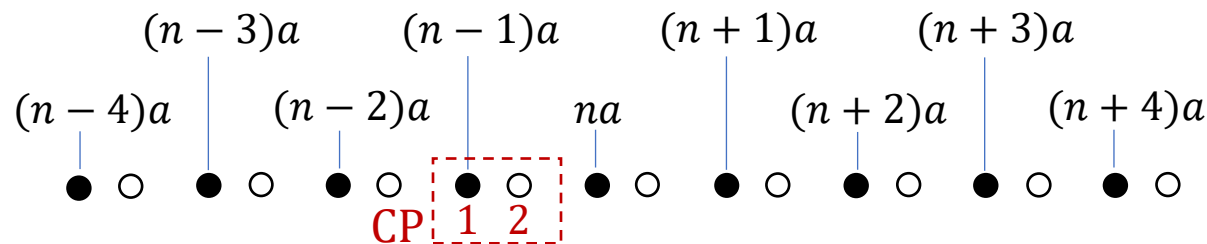
Ecuaciones de movimiento

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

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

Modos vibracionales: Cadena unidimensional con base

Modos normales de una red unidimensional con una base (átomos iguales)



Frecuencias y amplitudes de modos normales

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

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

$$\rightarrow [M\omega^2 - (C + G)]^2 = C^2 + G^2 + 2CG \cos(ka)$$

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

Dividiendo entre sí

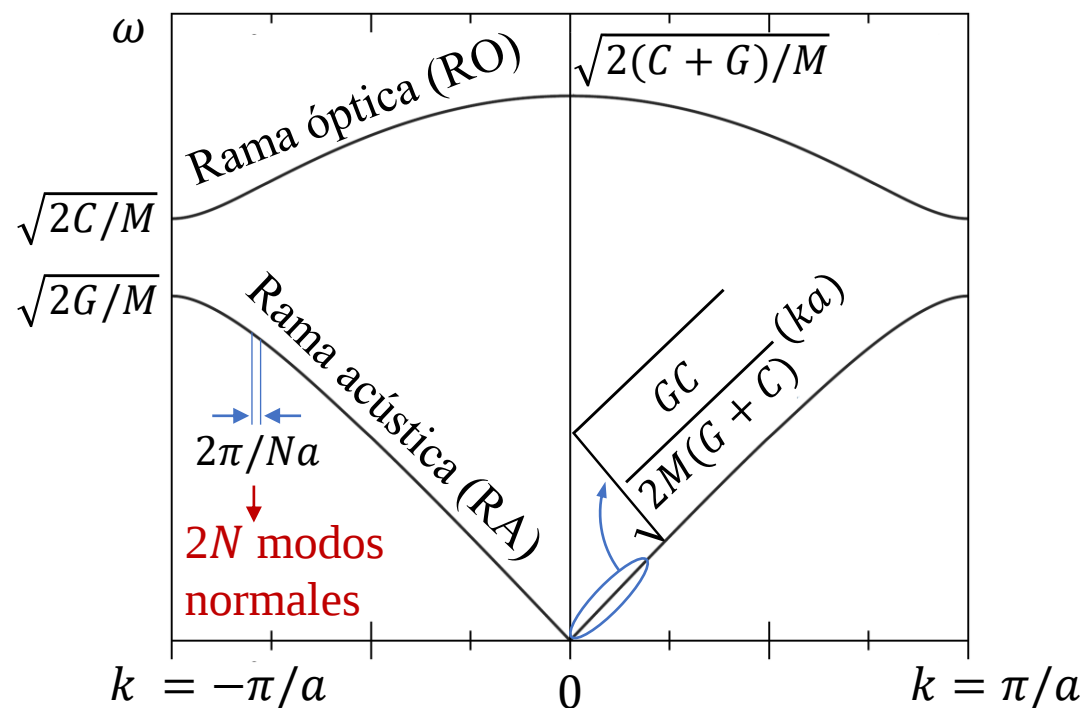
$$\boxed{\frac{\epsilon_2}{\epsilon_1} = \mp \frac{C + G e^{ika}}{|C + G e^{ika}|}}$$

Modos vibracionales: Cadena unidimensional con base

Modos normales de una red unidimensional con una base (átomos iguales): Cadena finita

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

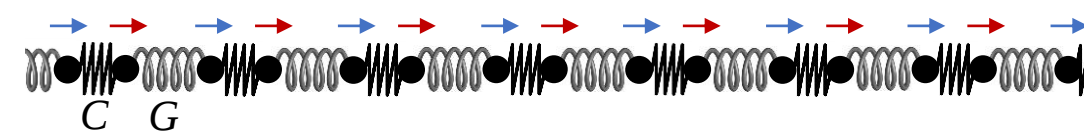
$$\begin{cases} u_1 = \epsilon_1 e^{i(kna - \omega t)} \\ u_2 = \epsilon_2 e^{i(kna - \omega t)} \end{cases} \quad \frac{\epsilon_2}{\epsilon_1} = \mp \frac{C + G e^{ika}}{|C + G e^{ika}|}$$



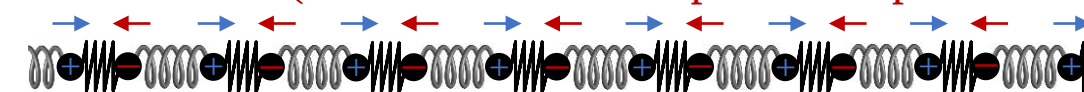
Casos límites

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

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

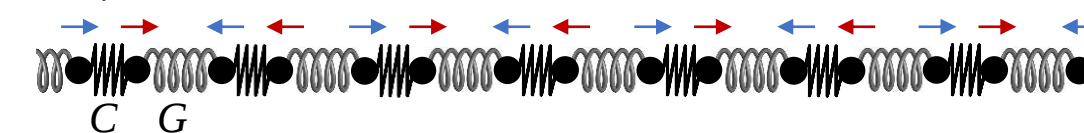


RO: $\omega \sim \text{THz}$ (En un sólido iónico podría acoplarse a una OE)

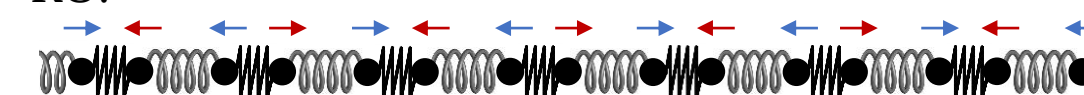


- $k = \pi/a \rightarrow \frac{\epsilon_2}{\epsilon_1} = \mp 1$ (-: RO; +: RA)

RA:



RO:



Modos vibracionales: Planteo general

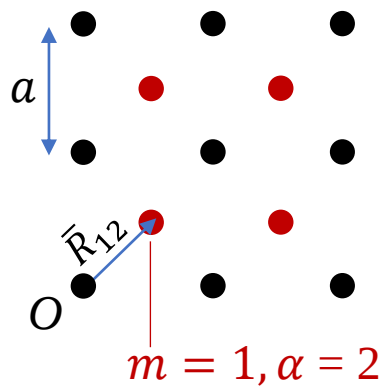
Vibraciones en RB + Base (3D)

Punto de la RB

$$\bar{r}_{m\alpha} = \bar{R}_{m\alpha} + \bar{u}_{m\alpha} \quad \bar{R}_{m\alpha} = \bar{R}_m + \bar{d}_\alpha$$

Elemento de la base

$$\begin{cases} \bar{a}_1 = a\hat{x} \\ \bar{a}_2 = a\hat{y} \\ \bar{d}_1 = \bar{0}\hat{x} \\ \bar{d}_2 = (a/2)(\hat{x} + \hat{y}) \end{cases}$$



Índices $\begin{cases} i, j, l = \text{Coordenadas cartesianas } (x, y, z) \\ m, n, p, q = \text{Puntos de la RB } (1, 2, \dots, N) \\ \alpha, \beta, \gamma, \sigma = \text{Elementos de la base } (1, 2, \dots, P) \end{cases}$

$\rightarrow r_{m\alpha}^i$: Proyección en la dirección $\hat{i}$ del vector $\bar{r}_{m\alpha}$

RB $\longrightarrow U = \frac{1}{2} \sum_{\bar{R}, \bar{R}'} \phi(\bar{r}(\bar{R}) - \bar{r}(\bar{R}'))$

ϕ : Potencial de interacción entre pares de núcleos

$$\text{RB + Base} \longrightarrow U = \frac{1}{2} \sum_{p,q} \sum_{\gamma,\sigma} \phi(\bar{r}_{p\gamma} - \bar{r}_{q\sigma})$$

Modos vibracionales: Planteo general

Aproximación armónica en 3D

i, j, l = Coordenadas cartesianas (x, y, z)
 m, n, p, q = Puntos de la RB ($1, 2, \dots, N$)
 $\alpha, \beta, \gamma, \sigma$ = Elementos de la base ($1, 2, \dots, P$)

$$\begin{aligned}
 U(\bar{r}_{11}, \dots, \bar{r}_{1P}, \dots, \bar{r}_{N1}, \dots, \bar{r}_{NP}) &= U(\bar{R}_{11} + \bar{u}_{11}, \dots, \bar{R}_{NP} + \bar{u}_{NP}) = \\
 &= \underbrace{U(\bar{R}_{11}, \dots, \bar{R}_{NP})}_{\text{Taylor a } U_{eq} \text{ 2º orden}} + \sum_{n,\beta,i} \underbrace{\frac{\partial U(\bar{R}_{11}, \dots, \bar{R}_{NP})}{\partial r_{n\beta}^i}}_{= 0 \text{ (Componente } i \text{ de la fuerza neta sobre el núcleo } n\beta \text{ en el equilibrio)}} u_{n\beta}^i + \frac{1}{2} \sum_{m,n} \sum_{\alpha,\beta} \sum_{i,j} \frac{\partial^2 U(\bar{R}_{11}, \dots, \bar{R}_{NP})}{\partial r_{m\alpha}^i \partial r_{n\beta}^j} u_{m\alpha}^i u_{n\beta}^j
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 U &= \frac{1}{2} \sum_{p,q} \sum_{\gamma,\sigma} \phi(\bar{r}_{p\gamma} - \bar{r}_{q\sigma}) \rightarrow \frac{\partial U}{\partial r_{n\beta}^j} = \frac{1}{2} \sum_{p,q} \sum_{\gamma,\sigma} \frac{\partial \phi(\bar{r}_{p\gamma} - \bar{r}_{q\sigma})}{\partial r^j} \underbrace{\frac{\partial (r_{p\gamma}^j - r_{q\sigma}^j)}{\partial r_{n\beta}^j}}_{\delta_{pn}\delta_{\gamma\beta} - \delta_{qn}\delta_{\sigma\beta}} \\
 \rightarrow \frac{\partial^2 U}{\partial r_{m\alpha}^i \partial r_{n\beta}^j} &= \frac{1}{2} \sum_{p,q} \sum_{\gamma,\sigma} \frac{\partial \phi(\bar{r}_{p\gamma} - \bar{r}_{q\sigma})}{\partial r^i \partial r^j} (\delta_{pn}\delta_{\gamma\beta} - \delta_{qn}\delta_{\sigma\beta}) \underbrace{\frac{\partial (r_{p\gamma}^i - r_{q\sigma}^i)}{\partial r_{m\alpha}^i}}_{\delta_{pm}\delta_{\gamma\alpha} - \delta_{qm}\delta_{\sigma\alpha}}
 \end{aligned}$$

Modos vibracionales: Planteo general

Aproximación armónica en 3D

i, j, l = Coordenadas cartesianas (x, y, z)
 m, n, p, q = Puntos de la RB ($1, 2, \dots, N$)
 $\alpha, \beta, \gamma, \sigma$ = Elementos de la base ($1, 2, \dots, P$)

$$U = U_{eq} + \frac{1}{2} \sum_{m,n} \sum_{\alpha,\beta} \sum_{i,j} \frac{\partial^2 U(\bar{R}_{11}, \dots, \bar{R}_{NP})}{\partial r_{m\alpha}^i \partial r_{n\beta}^j} u_{m\alpha}^i u_{n\beta}^j = U_{eq} + U_a$$

$$\frac{\partial^2 U}{\partial r_{m\alpha}^i \partial r_{n\beta}^j} = \frac{1}{2} \sum_{p,q} \sum_{\gamma,\sigma} \frac{\partial^2 \phi(\bar{r}_{p\gamma} - \bar{r}_{q\sigma})}{\partial r^i \partial r^j} \underbrace{(\delta_{pn} \delta_{\gamma\beta} - \delta_{qn} \delta_{\sigma\beta})(\delta_{pm} \delta_{\gamma\alpha} - \delta_{qm} \delta_{\sigma\alpha})}_{\delta_{pn} \delta_{pm} \delta_{\gamma\beta} \delta_{\gamma\alpha} - \delta_{qn} \delta_{\sigma\beta} \delta_{pm} \delta_{\gamma\alpha} - \delta_{pn} \delta_{\gamma\beta} \delta_{qm} \delta_{\sigma\alpha} + \delta_{qn} \delta_{\sigma\beta} \delta_{qm} \delta_{\sigma\alpha}} =$$

$$\delta_{pn} \delta_{pm} \delta_{\gamma\beta} \delta_{\gamma\alpha} - \delta_{qn} \delta_{\sigma\beta} \delta_{pm} \delta_{\gamma\alpha} - \delta_{pn} \delta_{\gamma\beta} \delta_{qm} \delta_{\sigma\alpha} + \delta_{qn} \delta_{\sigma\beta} \delta_{qm} \delta_{\sigma\alpha}$$

$$\frac{1}{2} \sum_{q,\sigma} \frac{\partial^2 \phi(\bar{r}_{m\alpha} - \bar{r}_{q\sigma})}{\partial r^i \partial r^j} \delta_{mn} \delta_{\alpha\beta} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \phi(\bar{r}_{m\alpha} - \bar{r}_{n\beta})}{\partial r^i \partial r^j} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \phi(\bar{r}_{n\beta} - \bar{r}_{m\alpha})}{\partial r^i \partial r^j} + \frac{1}{2} \sum_{p\gamma} \frac{\partial^2 \phi(\bar{r}_{p\gamma} - \bar{r}_{m\alpha})}{\partial r^i \partial r^j} \delta_{mn} \delta_{\alpha\beta}$$

$$= \sum_{q,\sigma} \underbrace{\frac{\partial^2 \phi(\bar{r}_{m\alpha} - \bar{r}_{q\sigma})}{\partial r^i \partial r^j}}_{\phi_{mq}^{ij}} \delta_{mn} \delta_{\alpha\beta} - \frac{\partial^2 \phi(\bar{r}_{m\alpha} - \bar{r}_{n\beta})}{\partial r^i \partial r^j}$$

$$U_a = \frac{1}{2} \sum_{m,n} \sum_{\alpha,\beta} \sum_{i,j} \left[\sum_{q,\sigma} \phi_{mq}^{ij} \delta_{mn} \delta_{\alpha\beta} - \phi_{mn}^{ij} \right] u_{m\alpha}^i u_{n\beta}^j$$

Evaluado en el equilibrio lo denotamos como: ϕ_{mq}^{ij}

Modos vibracionales: Planteo general

Ecuaciones de movimiento y modos normales

i, j, l = Coordenadas cartesianas (x, y, z)
 m, n, p, q = Puntos de la RB ($1, 2, \dots, N$)
 $\alpha, \beta, \gamma, \sigma$ = Elementos de la base ($1, 2, \dots, P$)

$$M_\gamma \ddot{u}_{p\gamma}^l = - \frac{\partial U_a}{\partial u_{p\gamma}^l} =$$

$$= - \frac{\partial \left(\frac{1}{2} \sum_{m,n} \sum_{\alpha,\beta} \sum_{i,j} \left[\sum_{q,\sigma} \phi_{\alpha\sigma}^{ij} \delta_{mn} \delta_{\alpha\beta} - \phi_{\alpha\beta}^{ij} \right] u_{m\alpha}^i u_{n\beta}^j \right)}{\partial u_{p\gamma}^l} = - \sum_{m,\alpha,i} \left[\sum_{q,\sigma} \phi_{\alpha\sigma}^{il} \delta_{mp} \delta_{\alpha\gamma} - \phi_{\alpha\gamma}^{il} \right] u_{m\alpha}^i$$

→ Sistema de $3 \times N \times P$ ecuaciones acopladas (número igual al de grados de libertad del sistema)

Buscamos soluciones de la forma: $\bar{u}_{p\gamma} = \bar{\epsilon}_\gamma e^{i(\bar{k}\bar{R}_p - \omega t)}$

$$\rightarrow -M_\gamma \omega^2 \epsilon_\gamma^l e^{i(\bar{k}\bar{R}_p - \omega t)} = - \sum_{m,\alpha,i} \left[\sum_{q,\sigma} \phi_{\alpha\sigma}^{il} \delta_{mp} \delta_{\alpha\gamma} - \phi_{\alpha\gamma}^{il} \right] \epsilon_\alpha^i e^{i(\bar{k}\bar{R}_m - \omega t)}$$

$$\rightarrow M_\gamma \omega^2 \epsilon_\gamma^l = \sum_{\alpha,i} \left\{ \sum_m e^{i\bar{k}(\bar{R}_m - \bar{R}_p)} \left[\sum_{q,\sigma} \phi_{\alpha\sigma}^{il} \delta_{mp} \delta_{\alpha\gamma} - \phi_{\alpha\gamma}^{il} \right] \right\} \epsilon_\alpha^i = \sum_{\alpha,i} \mathfrak{D}_{\alpha\gamma}^{il}(\bar{k}) \epsilon_\alpha^i$$

Modos vibracionales: Planteo general

Ecuaciones de movimiento y modos normales

$$M_\gamma \omega^2 \epsilon_\gamma^l = \sum_{\alpha, i} \mathcal{D}_{\alpha\gamma}^{il}(\bar{k}) \epsilon_\alpha^i$$

$$\mathcal{D}_{\alpha\gamma}^{il}(\bar{k}) = \sum_m \left(\sum_{q, \sigma} \phi_{\alpha\sigma}^{il}{}_{mq} \delta_{mp} \delta_{\alpha\gamma} - e^{i\bar{k}(\bar{R}_m - \bar{R}_p)} \phi_{\alpha\gamma}^{il}{}_{mp} \right)$$

$$\text{Definiendo: } \tilde{\epsilon}_\gamma^l = \sqrt{M_\gamma} \epsilon_\gamma^l \longrightarrow \sqrt{M_\gamma} \omega^2 \tilde{\epsilon}_\gamma^l = \sum_{\alpha, i} \mathcal{D}_{\alpha\gamma}^{il}(\bar{k}) \frac{\tilde{\epsilon}_\alpha^i}{\sqrt{M_\alpha}} \longrightarrow \sum_{\alpha, i} \left(\frac{\mathcal{D}_{\alpha\gamma}^{il}(\bar{k})}{\sqrt{M_\alpha M_\gamma}} - \omega^2 \delta_{il} \delta_{\alpha\gamma} \right) \tilde{\epsilon}_\alpha^i = 0$$

$$\longrightarrow \boxed{[\bar{\bar{D}} - \omega^2 \mathbb{I}] \tilde{\epsilon} = 0} \quad \text{Ecuación de autovalores y autovectores}$$

i, j, l = Coordenadas cartesianas (x, y, z)
 m, n, p, q = Puntos de la RB ($1, 2, \dots, N$)
 $\alpha, \beta, \gamma, \sigma$ = Elementos de la base ($1, 2, \dots, P$)

$\mathcal{D}_{\alpha\gamma}^{il}(\bar{k})$: Elemento genérico de la matriz dinámica $\bar{\bar{D}}$

$$\phi_{\alpha\sigma}^{ij}{}_{mq} = \frac{\partial^2 \phi(\bar{r}_{m\alpha} - \bar{r}_{q\sigma})}{\partial r^i \partial r^j} \Big|_{Eq} = \frac{\partial^2 \phi(|\bar{r}|)}{\partial r^i \partial r^j} \Big|_{Eq} = \frac{\partial}{\partial r^i} \left(\phi'(|\bar{r}|) \frac{r^j}{|\bar{r}|} \right) \Big|_{Eq}$$

Producto de las proyecciones de los versores cartesianos de las coordenadas involucradas sobre la dirección que conecta a los átomos.

$$= \left[\phi''(|\bar{r}|) \frac{r^i}{|\bar{r}|} \frac{r^j}{|\bar{r}|} + \overset{=0}{\phi'(|\bar{r}|)} \frac{\delta_{ij}}{|\bar{r}|} - \overset{=0}{\phi'(|\bar{r}|)} \frac{r^i r^j}{|\bar{r}|^3} \right]_{Eq} = C_{mq\alpha\sigma} \frac{(R_{m\alpha}^i - R_{q\sigma}^i)(R_{m\alpha}^j - R_{q\sigma}^j)}{|\bar{R}_{m\alpha} - \bar{R}_{q\sigma}|^2}$$

Modos vibracionales: Planteo general

Condiciones de contorno periódicas de Born-von Karman

$$u(\bar{R}_{m\alpha} + N_i \bar{a}_i) = u(\bar{R}_{m\alpha}), \quad \bar{a}_i: \text{VP de la RD}; \quad N_1 N_2 N_3 = N \quad (N^\circ \text{ total de CP en el cristal}) \rightarrow e^{i\bar{k}(\bar{R}_m + N_i \bar{a}_i)} = e^{i\bar{k}\bar{R}_m}$$

$$\rightarrow e^{i\bar{k}N_i \bar{a}_i} = 1 \rightarrow \bar{k}N_i \bar{a}_i = 2\pi m, m \in \mathbb{Z} \rightarrow \bar{k} = \frac{m_1}{N_1} \bar{b}_1 + \frac{m_2}{N_2} \bar{b}_2 + \frac{m_3}{N_3} \bar{b}_3, m_i \in \mathbb{Z}, \bar{b}_i: \text{VP de la RR.}$$

$\rightarrow$ Desplazamientos de $\bar{k}$ en $\bar{K} \in \text{RR}$ no cambian la solución ($e^{i\bar{K}\bar{R}} = 1$)

N valores no equivalentes de $\bar{k}$.
Elegimos tomarlos dentro de la 1ZB.

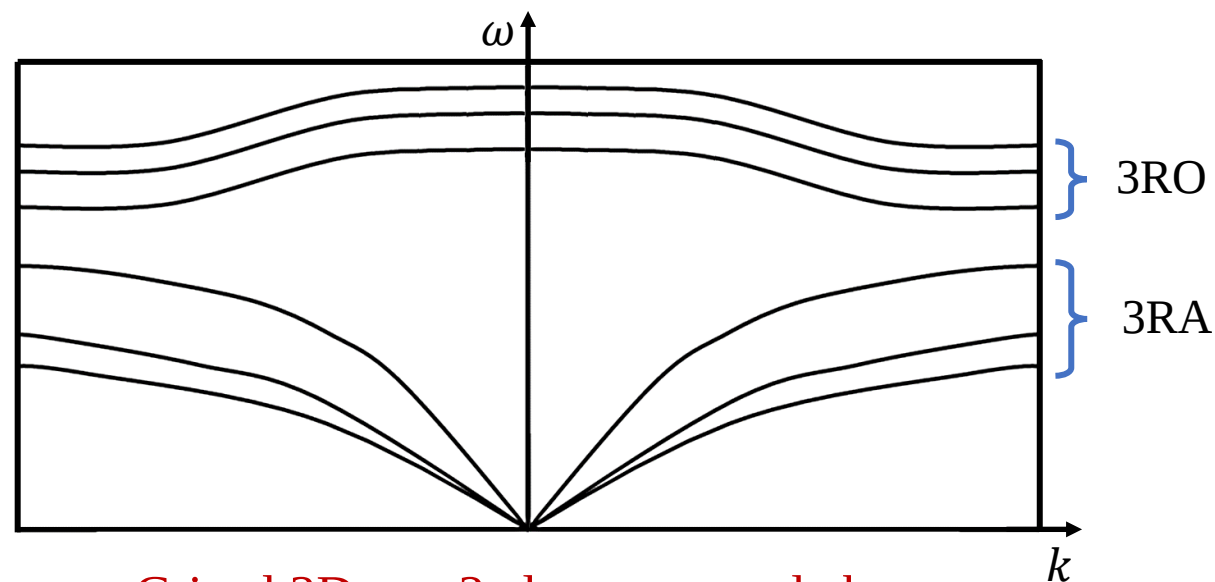
Ramas acústicas y ópticas

Tenemos $3 \times N \times P$ modos normales y N valores no equivalentes de $\bar{k}$.

$\rightarrow 3 \times P$ soluciones para cada valor de $\bar{k}$

$\rightarrow 3 \times P$ ramas $\left\{ \begin{array}{l} 3 \text{ son RA} \\ 3 \times (P - 1) \text{ son RO} \end{array} \right.$

d dimensiones $\rightarrow d$ RA y $d \times (P - 1)$ RO



Cristal 3D con 2 elementos en la base

Resumen

- Posición de núcleos en un cristal real
- Aproximación armónica en 1D
- Modos normales de una cadena lineal (RB)
- Modos normales de una cadena lineal (RB + base)
- Sólidos finitos y condiciones de contorno periódicas
- Planteo general en 3 dimensiones

