

**Dinámica de redes**

1. Hallar la relación de dispersión de fonones para una cadena lineal monoatómica con interacción a primeros vecinos.
2. Considere una cadena lineal formada por iones de masa  $m_1$  y  $m_2$ , con interacciones a primeros vecinos  $C$ .

a) Muestre que la relación de dispersión es:

$$\omega^2(k) = \frac{C}{\mu} \left( 1 \pm \sqrt{1 - 2 \frac{\mu^2}{m_1 m_2} [1 - \cos(ka)]} \right),$$

donde  $\mu$  es la masa reducida.

- b) Encuentre la relación de amplitud  $u/v$  para las dos ramas de  $\omega^2(k)$  para  $k$  en el borde de zona ( $k = \frac{\pi}{a}$ ).
  - c) Discuta la forma de la relación de dispersión y la naturaleza de los modos normales cuando  $m_1 \gg m_2$ .
  - d) Compare la relación de dispersión con la de la cadena monoatómica cuando  $m_1 \approx m_2$ . ¿Qué sucede cuando son iguales?
3. Halle los modos normales de vibración de una cadena lineal monoatómica en la que las constantes de fuerza entre primeros vecinos son alternadamente  $C_1 = C$  y  $C_2 = 10C$  y la distancia entre primeros vecinos es  $a/2$ . Calcule  $\omega(k)$  en  $k = 0$  y  $k = \pi/a$ . Grafique la relación de dispersión en la primera zona de Brillouin.
  4. Calcule la matriz dinámica para un cristal unidimensional con una base de tres átomos, A-B-A, de masas  $m_A$  y  $m_B$ . La cadena tiene constante de red  $a$ , y las posiciones de los átomos en la celda unidad son  $x(B) = 0$ ,  $x(A_1) = a/3$  y  $x(A_2) = 2a/3$ , e interactúan con constantes de fuerza  $C_{AB}$  y  $C_{AA}$  entre primeros vecinos respectivos.

Determine las frecuencias y los autovectores en  $k = 0$ .

5. Suponga una red rectangular plana monoatómica con parámetros de red  $a$  y  $b$ . Las constantes de fuerza entre átomos son  $C_1$  a primeros vecinos y  $C_2$  a segundos vecinos, respectivamente.
  - a) Halle la matriz dinámica del sistema, para una dirección de  $\mathbf{k}$  arbitraria en el plano.
  - b) Grafique la relación de dispersión en el siguiente recorrido de la primera zona de Brillouin:  $\Gamma \rightarrow X \rightarrow S \rightarrow \Gamma \rightarrow Y \rightarrow S$ , donde  $\Gamma = (0,0)$ ,  $X = (\pi/a, 0)$ ,  $Y = (0, \pi/b)$ ,  $S = (\pi/a, \pi/b)$ .
  - c) Considere el límite para  $ka \approx kb \ll 1$  e interprete lo obtenido.

6. Un cristal bidimensional de celda unidad rectangular ( $a=a$ ,  $b=2a$ ) tiene dos átomos (A y B, masas  $m_A$  y  $m_B$ ) por celda unidad, ubicados en posiciones  $(0,0)$  (el A) y  $(0, 1/2)$  (el B). Los átomos interactúan entre sí a través de constantes de fuerza  $C_{AA}$ ,  $C_{BB}$  y  $C_{AB}$ , a primeros vecinos, entre los átomos AA, BB y AB respectivamente, y constantes  $C_4$

---

entre átomos AB a segundos vecinos. Calcule la matriz dinámica de este problema para vectores de onda  $k$  en la dirección del lado b. Halle y grafique las curvas de dispersión correspondientes en esa dirección.

*Ayuda: en esa dirección se separan los modos longitudinales de los transversales.*

7. Considere un cristal cuya red es del tipo panal de abejas.
  - a) ¿Cuántas ramas fonónicas acústicas y cuántas ópticas existen?. Dibuje cualitativamente las curvas de dispersión en alguna dirección del espacio recíproco.
  - b) Tomando constantes de fuerza de valor  $C$  a primeros vecinos, encuentre las curvas de dispersión para la dirección  $k = \alpha a^*$  correspondientes a modos longitudinales y transversales. ¿Cómo se explica que los modos transversales no dependan del valor de  $k$ ? ¿Qué suposición habría que cambiar para que esto no fuera así?
  - c) Grafique cualitativamente la densidad de estados restringida a esta dirección. En base a esto, dibuje cualitativamente  $C_v$  vs  $T$ .
8. Calcule las dispersiones de los modos longitudinales y transversales en la dirección  $(1,0,0)$  de una red FCC monoatómica con interacciones a primeros vecinos. Calcule la velocidad del sonido para estos modos.

### Propiedades térmicas

9. A partir de la relación de dispersión de una cadena lineal monoatómica con interacciones a primeros vecinos, encuentre la densidad de estados de fonones o densidad de modos normales.
10. Suponiendo que la rama óptica en un sólido tridimensional tiene, cerca de  $k = 0$ , la forma  $\omega(k) = \omega_0 - Ak^2$ , muestre que la densidad de estados correspondiente a esa porción de la banda óptica es:
$$g(\omega) = \begin{cases} \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 2\pi A^{-3/2}(\omega_0 - \omega)^{\frac{1}{2}} & \omega \leq \omega_0 \\ 0 & \omega \geq \omega_0 \end{cases}$$
11. A bajas temperaturas el calor específico según el modelo de Debye tiene un comportamiento como  $T^3$ .
  - a) ¿Cómo se modifica esta dependencia si se considera un sólido unidimensional? ¿Y uno bidimensional?
  - b) Imaginar un cristal formado por planos atómicos débilmente acoplados entre sí. ¿Qué forma tendrá el calor específico para temperatura baja?
12. Empleando la aproximación de Debye para el cálculo del calor específico en una cadena monoatómica ¿se sobreestima o se subestima este valor (comparado con el real) a altas temperaturas?
13. Un cristal puede ser descrito por el modelo de Debye-Einstein con frecuencia de Debye  $\omega_D$  y frecuencia de Einstein  $\omega_E$ ,  $\omega_E \gg \omega_D$ . Hacer un gráfico cualitativo de la densidad de estados fonónica  $G(\omega)$ , indicando claramente la condición de normalización. Hacer otro del calor específico  $c_V$  en función de la temperatura, especificando su dependencia para  $T$  bajas y altas. Considere el problema en 1, 2 y 3 dimensiones.