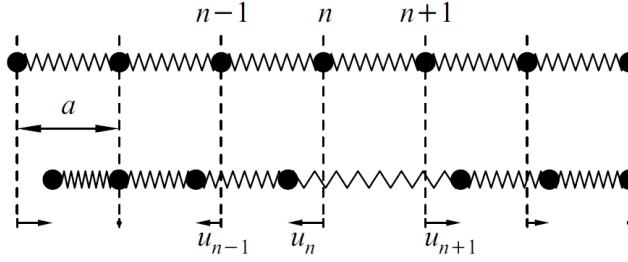


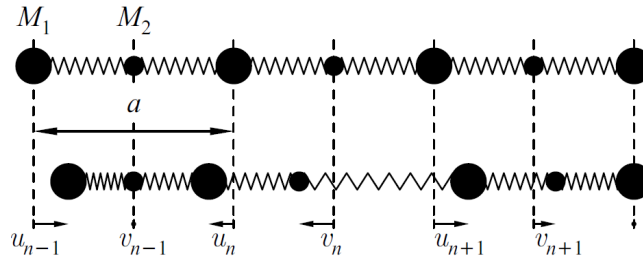
Práctica 4: Vibraciones de la red - fonones

1. Estudiar la dinámica de la red de las siguientes variantes de la cadena lineal. Examinar en particular los modos en el centro y borde de la primera zona de Brillouin.

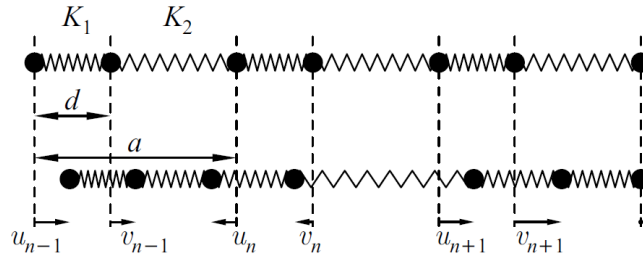
(a) Cadena lineal monoatómica



(b) Cadena lineal diatómica (considerar qué sucede en el caso $M_1 \gg M_2$)



(c) Cadena lineal monoatómica dimerizada (considerar qué sucede en el caso $K_1 \gg K_2$)



2. Calcular la relación de dispersión y analizar los modos de vibración de una red cuadrada bidimensional con interacciones como se muestra en la Figura 1 (K_L : constante de interacción longitudinal; K_T : constante de interacción transversal). Analizar en particular los modos en las direcciones $(q, 0)$ y (q, q) .
3. Considerar una cadena lineal monoatómica como la que se muestra en la Figura 2. Sobre la primera masa actúa una fuerza cosenoidal $F(t) = F_0 \cos(\omega_0 t)$. Describir el movimiento de los átomos de la cadena.

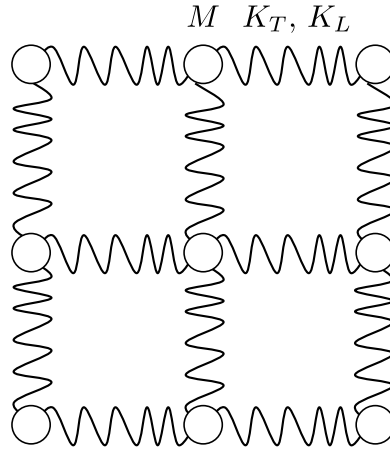


Figure 1: Red cuadrada.

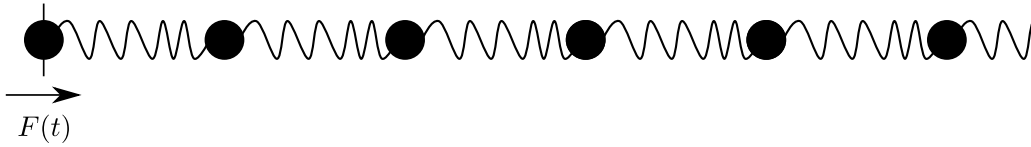
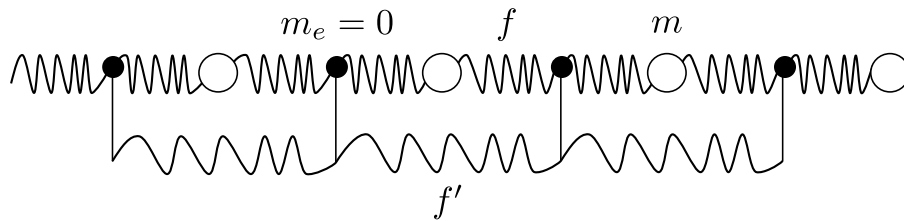


Figure 2: Cadena lineal monoatómica forzada.

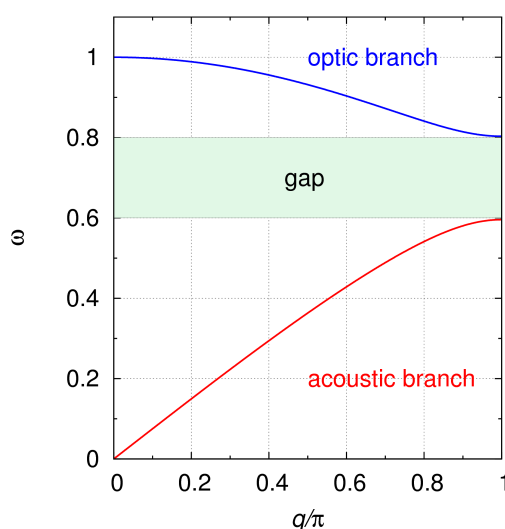
4. En los semiconductores covalentes (C, Si, Ge) y también en los parcialmente iónicos (GaAs), los electrones que forman los enlaces están parcialmente localizados entre los átomos. La dinámica de la red de estos compuestos es adecuadamente descrita por el modelo de “carga de enlace” (bond charge model), en el cuál se consideran cargas electrónicas ubicadas entre los iones, acopladas a ellos y entre sí. La masas de estas cargas se desprecian frente a la de los iones, de modo que se reacomodan adiabáticamente según los iones se desplazan. Este modelo describe una característica común de dichos compuestos: las ramas TA tienen frecuencias muy bajas y son muy chatas hacia el borde de la primera zona de Brillouin, mientras que sus pendientes cerca de $q = 0$ son bastante grandes.

La esencia de este modelo se ilustra en la cadena monoatómica de la Figura, donde se ubica una carga de enlace entre cada par de iones.



Consideremos un acoplamiento armónico f entre la carga y cada ion, y otro f' entre las cargas a cada lado de un ion. Sea m la masa iónica. La masa de la carga de enlace se considera nula, de modo que ellas, en lugar de satisfacer una ecuación dinámica, obedecen una condición de equilibrio (condición adiabática) para una configuración instantánea de iones.

- (a) Obtener las ecuaciones de movimiento y la relación de dispersión $\omega(q)$.
 - (b) Mostrar que para $q \rightarrow 0$ se obtiene $\omega(q) = cq$, donde $c^2 = (f + 2f')/(2m)$.
 - (c) Mostrar que para valores crecientes de f' la rama se achata hacia el borde de la primera zona de Brillouin, y que de esta manera, el modelo da cuenta de la característica común que presentan las ramas TA en los semiconductores covalentes.
5. (a) Calcular la densidad de modos de vibración $g(\omega)$ para una red lineal monoatómica de N átomos. ¿Por qué se observan divergencias (singularidades de van Hove)?
- (b) A partir de la relación de dispersión de una cadena diatómica como la que se muestra en la Figura, hacer un dibujo cualitativo de $g(\omega)$.

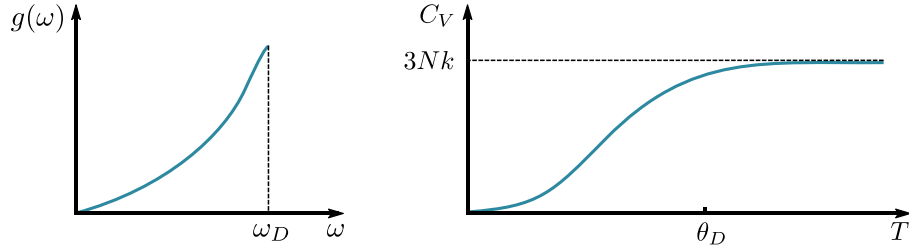


Relación de dispersión de la cadena diatómica. Ejercicio 5-b.

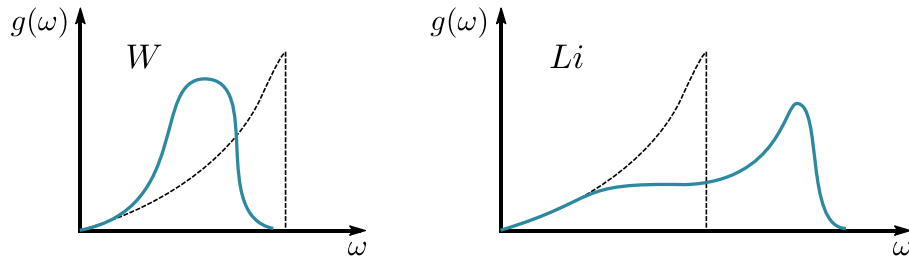
6. La relación de dispersión de una red cuadrada monoatómica fue obtenida en el problema 2. Asigne valores numéricos adecuados a K_L , K_T , y m . Calcule, usando la PC, la densidad de estados de modos de vibración $g(\omega)$ mediante la construcción de un histograma. Esto es, divida el rango válido de q_x y q_y , en partes iguales. Divida el rango de frecuencias en partes iguales. Cuente cuántos estados caen dentro de un dado intervalo de frecuencia y dibuje un histograma. Analizar cómo cambia el histograma a medida que se aumenta el número de divisiones.
7. Calcular la densidad de modos de vibración y la dependencia con la temperatura del calor específico de un sólido de Debye en 1, 2, y 3 dimensiones. Repetir lo mismo utilizando el modelo de Einstein.
8. Calcular el número medio de fonones como función de la temperatura en un cristal monoatómico construido por N_A átomos, utilizando:
- (a) El modelo de Debye.
 - (b) El modelo de Einstein

Analizar en particular el comportamiento para altas y bajas temperaturas. Explicar el porqué de semejanzas y diferencias.

9. La densidad de estados $g(\omega)$ y el calor específico de un sólido de Debye son la siguientes



El tungsteno y el litio tienen las siguientes densidades de estado, dibujadas sobre el fondo de la de Debye



Las integrales de las tres densidades mostradas son iguales, como también lo son las velocidades del sonido en los tres sólidos. Dibuje esquemáticamente los calores específicos del W y del Li sobre la curva del de Debye. Explique el porqué de las semejanzas y diferencias.

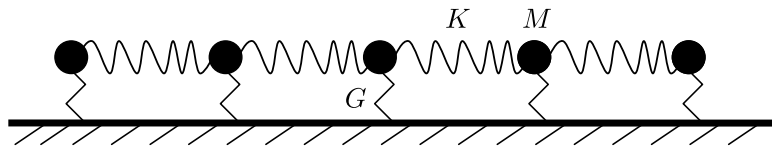
10. Utilizando la relación de dispersión obtenida en el problema 4, hacer un gráfico comparativo de $\omega(q)$ para dos sistemas caracterizados por los siguientes parámetros:

Sistema A: $f = 2f_0$, $f' = f_0$, y $m = m_0$.

Sistema B: $f = f_0$, $f' = 4f_0$, y $m = m_0$.

Mostrar las semejanzas y diferencias que existen entre estos dos sistemas en lo que se refiere al comportamiento de sus calores específicos con la temperatura. Analizar en forma detallada lo que ocurre en el límite de bajas temperaturas.

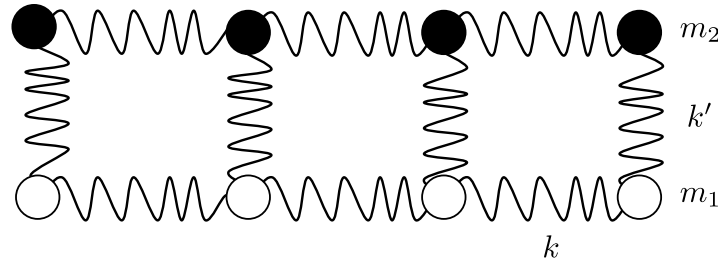
11. La siguiente Figura representa las interacciones de un material monoatómico unidimensional depositado sobre un sustrato rígido.



Los resortes actúan sólo ante desplazamientos longitudinales (esto es, cuando los desplazamientos son en la misma dirección en que está dibujado el resorte).

- (a) Calcule la relación de dispersión de los diferentes modos. Grafíquela.
- (b) Calcule y grafique la densidad de estados asociada $g(\omega)$.
- (c) Calcule la dependencia con la temperatura del calor específico en el límite de bajas temperaturas.
- (d) Suponga que este material es depositado sobre dos sustratos diferentes, de forma tal que la interacción sustrato-material es en un caso muy fuerte y en el otro muy débil. Es decir, para un mismo valor de K se tienen los siguientes casos:
 Sustrato 1: $G_1 \gg K$.
 Sustrato 2: $G_2 \ll K$.
 Dibuje esquemáticamente la dependencia con la temperatura del calor específico para estos dos casos. Explique el porqué de semejanzas y diferencias.

12. Considere la siguiente estructura unidimensional (dos cadenas acopladas).



- (a) Encuentre un modelo en forma de cadena que sea isomorfo al modelo planteado.
 - (b) Establezca la celda unitaria y el motivo.
 - (c) Calcule la relación de dispersión de fonones.
 - (d) Considere los límites
 - i. $k' = 0$ con $m_1 \neq m_2$.
 - ii. $k = 0$ con $m_1 = m_2$.
13. *Desafío:* Consideramos el siguiente modelo para un material conocido como casi-unidimensional. Los átomos ocupan las posiciones de una red cuadrada bidimensional de constante a . El sistema está constituido por una serie de cadenas a lo largo de la dirección x , débilmente acopladas entre sí a lo largo de la dirección y (un ejemplo tridimensional de este sistema lo constituye el grafito). La relación de dispersión de fonones se puede aproximar en toda la zona de Brillouin por la siguiente ley

$$\omega^2(k_x, k_y) = c^2 k_x^2 + c'^2 k_y^2$$

con $c' \ll c$. El problema trata sobre el comportamiento del calor específico en diferentes regímenes de temperatura.

- (a) Muestre que el calor específico puede expresarse como una integral doble cuyos límites superiores son T_1/T y T_2/T , con $k_B T_1 = \hbar c \pi / a$ y $k_B T_2 = \hbar c' \pi / a$. Esto lleva a pensar en dos temperaturas T_1 y T_2 características de este material. La relación entre c y c' implica que $T_2 \ll T_1$.

(b) Analice entonces la dependencia con la temperatura del calor específico para los siguientes casos:

- i. $T \ll T_1, T_2$
- ii. $T_2 \ll T \ll T_1$
- iii. $T \gg T_1, T_2$

14. *Desafío: Efecto de las anarmonicidades de los fonones: tratamiento clásico.*

Como usted sabe, la curva de dispersión de fonones de un cristal se obtiene mediante una “aproximación armónica” del potencial cristalino. Si bien muchos de los resultados obtenidos con esta aproximación están en muy buen acuerdo con propiedades observadas experimentalmente, existen algunas propiedades del cristal (conductividad térmica, expansión térmica, etc.) que no pueden describirse en el marco de esta aproximación. Para estudiar estas propiedades, términos de orden superior a 2 deben incluirse en el desarrollo de pequeñas oscilaciones del potencial (términos anarmónicos). Mediante una teoría un tanto sofisticada, puede demostrarse que las anarmonicidades producen dos efectos importantes en los fonones:

- (a) Un corrimiento de su energía.
- (b) La existencia de un tiempo de vida media.

Estos dos efectos pueden ser simulados clásicamente, en forma cualitativa, mediante la introducción de un término de fricción. Resolveremos entonces el siguiente problema.

Considerar una cadena lineal monoatómica de masa M que interacciona a primeros vecinos con una constante de acoplamiento K . Suponga que sobre cada átomo de la cadena actúa, además de la fuerza elástica, una fuerza de fricción opuesta a su velocidad $F = -\gamma v_n$. Suponer que γ es muy pequeño de forma tal que $\gamma^2/M \ll K$.

- (a) Calcular el corrimiento de la frecuencia del modo de borde de zona ($q = \pi/a$) respecto a la frecuencia original (cristal sin fricción).
- (b) Si este modo de borde de zona es excitado en $t = 0$, estimar cuánto tiempo tarda en decaer esta oscilación. ¿Cuál será el tiempo de vida media de este fonón?
- (c) Dibujar, lo más detalladamente que pueda, la parte real $\Re(\omega)$ vs. q y la parte imaginaria $\Im(\omega)$ vs. q . Interpretar físicamente que ocurre con los diferentes modos de vibración. ¿Qué ocurre, en particular, con los modos de larga longitud de onda?

15. *Desafío: Criterio de Lindemann para la fusión de un cristal.*

En 1910 Lindemann propuso un criterio para conectar la temperatura de la transición desde el estado sólido hacia el líquido, vinculando la misma con la amplitud de las oscilaciones de los átomos de la fase sólida. El criterio establece que un sólido se funde cuando la amplitud de oscilación de los átomos supera una cierta fracción (del orden del 10%) de la distancia entre átomos vecinos. Analicemos la validez de este criterio para metales simples:

- (a) Modelicemos a un metal monoatómico con átomos de masa m como un sólido de Debye con temperatura característica T_D . Calcule la dependencia con la temperatura del valor cuadrático medio de las posiciones $\langle u^2 \rangle$ en el régimen de validez de la mecánica estadística clásica ($T \gg T_D$).
- (b) En la siguiente tabla mostramos la temperatura de fusión T_F , la T_D obtenida a partir del calor específico, la constante de red a , y el peso molecular A para 4 metales. Calcule el número de Lindemann $x_m = \sqrt{\langle u^2 \rangle}/a$ y discuta la validez del criterio de Lindemann.

Elemento	$T_F(K)$	T_D	$a(\text{\AA})$	A	x_m
Al	933	394	4.05	26.982	
Cu	1356	315	3.61	63.55	
Ag	1234	215	4.09	107.87	
Pb	601	88	4.95	207.19	