

**Estructura de la Materia 2**  
**Segundo Cuatrimestre 2020**  
**Guía 3: Dinámica de Redes y Propiedades Térmicas**

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

(a) Mostrar que la relación de dispersión es:

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

( $\mu$  es la masa reducida.)

- (b) Encontrar la relación de amplitud  $u/v$  de las dos ramas de  $\omega^2(k)$  para  $k$  en el borde de zona ( $k = \frac{\pi}{a}$ ).
  - (c) Discutir la forma de la relación de dispersión y la naturaleza de los modos normales cuando  $m_1 \gg m_2$ .
  - (d) Comparar la relación de dispersión con la de la cadena monoatómica cuando  $m_1 \approx m_2$ . ¿Qué sucede cuando son iguales?
3. Hallar los modos normales de vibración de una cadena lineal monoatómica en la que las constantes de fuerza entre primeros vecinos son alternadamente  $C$  y  $10C$ . La distancia entre primeros vecinos es  $a/2$ . Encontrar  $\omega(k)$  en  $k = 0$  y  $k = \pi/a$ . Dibujar la relación de dispersión.
  4. Calcular 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. Calcular las frecuencias y los autovectores en  $k = 0$ .
  5. Sea 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.
    - (a) Hallar la matriz dinámica del sistema, para una dirección de  $\mathbf{k}$  arbitraria en el plano.
    - (b) Graficar 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) Hallar el límite para  $ka \approx kb \ll 1$ .

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. Hallar la matriz dinámica de este problema para vectores de onda  $k$  en la dirección del lado b. Hallar y graficar las curvas de dispersión correspondientes en esa dirección. (Ayuda: en esa dirección de  $k$  se separan los modos longitudinales de los transversales).
7. Sea un cristal cuya red es del tipo panal de abejas:
- ¿Cuántas ramas fonónicas acústicas y cuántas ópticas existen?. Dibujar cualitativamente las curvas de dispersión en alguna dirección del espacio recíproco.
  - Tomando constantes de fuerza  $C$  a primeros vecinos, hallar las curvas de dispersión para la dirección  $k = \alpha a^*$  correspondientes a modos longitudinales y transversales. ¿Cómo se explica que los modos transversales no dependen del valor de  $k$ ? ¿Qué suposición habría que cambiar para que esto no fuera así?
  - Graficar cualitativamente la densidad de estados restringida a esta dirección. En base a esto, dibujar cualitativamente  $C_v$  vs  $T$ .
8. Calcular las dispersiones de los modos longitudinales y transversales en la dirección  $(1,0,0)$  de una red FCC monoatómica con interacciones a primeros vecinos. Calcular la velocidad del sonido para estos modos.
9. A partir de la relación de dispersión de una cadena lineal monoatómica con interacciones a primeros vecinos encontrar la densidad de estados de fonones.
10. Suponiendo que la rama óptica en un sólido tridimensional tiene, cerca de  $k = 0$ , la forma  $\omega(k) = \omega_0 - Ak^2$ , mostrar que la densidad de estados correspondiente a esa porción de la banda óptica es:
- $$D(\omega) = \begin{cases} \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 2\pi A^{-3/2}(\omega_0 - \omega)^{\frac{1}{2}} & \omega \leq \omega_0 \\ 0 & \omega \geq \omega_0 \end{cases}$$
11. Considere dos partículas de masa  $m$  en un pozo de potencial, representado por un resorte de constante elástica  $k$ . Están interactuando entre ellas mediante un resorte de constante  $K$  y moviéndose solo a lo largo de un eje  $\hat{x}$ . Si la energía potencial se escribe como:
- $$U = \frac{k}{2}(x_1^2 + x_2^2) + \frac{K}{2}(x_1 - x_2)^2$$
- Obtenga las ecuaciones clásicas de movimiento para las partículas.
  - Usando la transformación de coordenadas  $x_{rel} = (x_1 - x_2)$  y  $x_{cm} = (x_1 + x_2)/2$ , muestre que el sistema de ecuaciones de movimiento acopladas del ítem anterior se

convierte en un sistema equivalente de ecuaciones diferenciales desacopladas y que las frecuencias de los dos modos normales de vibración son:

$$\omega_{cm} = \sqrt{k/m}$$

$$\omega_{rel} = \sqrt{(k + 2K)/m}$$

- (c) Considere la versión cuántica del mismo problema. El hamiltoniano es:

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + U(x_1, x_2)$$

Transforme nuevamente a coordenadas  $x_{cm}$  y  $x_{rel}$ . Defina los momentos  $p_{rel} = (p_1 - p_2)/2$  y  $p_{cm} = (p_1 + p_2)$ .

- (d) Muestre que  $[p_\alpha, x_\gamma] = -i\hbar \delta_{\alpha,\gamma}$ , donde  $\alpha$  y  $\gamma$  toman los valores  $cm$  y  $rel$ .

- (e) En términos de estas nuevas coordenadas, muestre que el hamiltoniano se desacopla en dos hamiltonianos correspondientes a osciladores armónicos independientes con frecuencias  $\omega_{cm}$  y  $\omega_{rel}$ . Concluya que los autovalores del sistema son:

$$E_{n_{rel}, n_{cm}} = \hbar\omega_{rel}(n_{rel} + \frac{1}{2}) + \hbar\omega_{cm}(n_{cm} + \frac{1}{2}), \text{ donde } n_{rel} \text{ y } n_{cm} \text{ son enteros no negativos.}$$

12. Considere un conjunto de  $N$  partículas  $a = 1, 2, \dots, N$  con masas  $m_a$  moviéndose en una dimensión e interactuando entre ellas con un potencial:

$$U = \frac{1}{2} \sum_{a,b} x_a V_{a,b} x_b$$

donde  $x_a$  es la desviación de la posición de equilibrio de la partícula  $a$  y  $V$ , sin pérdida de generalidad, puede ser considerada una matriz simétrica.

- (a) Definiendo  $y_a = \sqrt{m_a} x_a$  muestre que las ecuaciones clásicas de movimiento son:

$$\ddot{y}_a = - \sum_b S_{a,b} y_b$$

$$\text{con } S_{a,b} = \frac{1}{\sqrt{m_a}} V_{a,b} \frac{1}{\sqrt{m_b}}$$

Muestre que las soluciones son:

$$y_a^{(m)} = e^{-i\omega_m t} s_a^{(m)}$$

donde  $\omega_m^2$  es el  $m$ -ésimo autovalor de la matriz  $S$  con autovector  $s_a^{(m)}$ . Estos son los  $N$  modos normales del sistema.

- (b) Recuerde las relaciones de ortogonalidad para autovectores de matrices hermíticas:

$$\sum_a [s_a^{(m)}]^* [s_a^{(n)}] = \delta_{m,n}$$

$$\sum_m [s_a^{(m)}]^* [s_b^{(n)}] = \delta_{a,b}$$

Como  $S$  es simétrica y por lo tanto hermítica, sus autovectores pueden ser elegidos reales. Construya las coordenadas transformadas:

$$Y^{(m)} = \sum_a s_a^{(m)} x_a \sqrt{m_a}$$

$$P^{(m)} = \sum_a s_a^{(m)} p_a / \sqrt{m_a}$$

muestre que estas coordenadas tienen las relaciones de conmutación:

$$[P^{(m)}, Y^{(n)}] = -i\hbar \delta_{n,m}$$

y que en términos de estas nuevas coordenadas el hamiltoniano queda escrito como:

$$H = \sum_m \left( \frac{1}{2} (P^{(m)})^2 + \frac{1}{2} \omega_m^2 (Y^{(m)})^2 \right)$$

Concluya que las autofunciones del problema cuántico son  $\omega_m$ , las mismas que en la resolución clásica.

13. 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  $T \rightarrow 0$ ?
14. 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?
15. 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  $D(\omega)$ , indicando claramente la condición de normalización. Hacer otro de  $c_v = c_v(T)$ , especificando su dependencia para  $T \rightarrow 0$  y para temperaturas altas. Considerar el problema en 1, 2 y 3 dimensiones.