



# FÍSICA DEL ESTADO SÓLIDO



**TEMA 3**

**VIBRACIONES RETICULARES: FONONES**

# CONTENIDO

## La aproximación armónica

## Modelo de Debye

Hipótesis del modelo

Densidad de modos  $D(\vec{k})$

Densidad de modos  $D(\omega)$

Calor específico reticular

## Cadena lineal monoatómica

Aproximación de primeros vecinos

Relación de dispersión

## Cadena lineal diatómica

Relación de dispersión

Ramas acústicas y ópticas

## Espectro general de vibración

Ramas del espectro

Modos longitudinales y transversales

## Densidad de modos de vibración

## Fonones

Momento cristalino

Energía



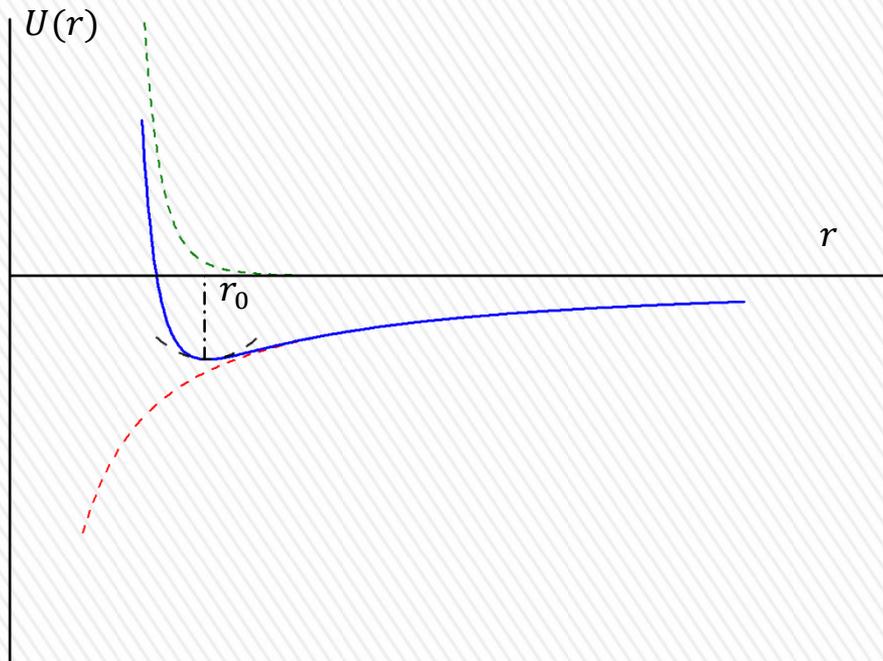
# APROXIMACIÓN ARMÓNICA

$$H_e = T_e(\{\vec{p}_i\}) + U'_e(\{\vec{r}_i\}) + U_{ePR}(\{\vec{r}_i\}, \{\vec{R}_j^0\})$$

Electrones

$$H_{PR} = T_{PR}(\{\vec{P}_j\}) + U'_{PR}(\{\vec{R}_j\}) + U_{ePR}(\{\vec{R}_j\}, \{\vec{r}_i^0\})$$

Partículas reticulares



$$U(\vec{r}) = U(\{\vec{r}_0\}) + \vec{\nabla}U(\vec{r})\Big|_{\vec{r}_0} \cdot \vec{u} + \frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{\partial^2 U(\vec{r})}{\partial r_i \partial r_j} \Big|_{\vec{r}_0} u_i u_j + O(\{u_i^3\})$$

$$\vec{u} = \vec{r} - \vec{r}_0$$

$$U(\vec{r}) \approx U(\{\vec{r}_0\}) + \frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{\partial^2 U(\vec{r})}{\partial r_i \partial r_j} \Big|_{\vec{r}_0} u_i u_j$$

**APROXIMACIÓN ARMÓNICA**

**VIBRACIONES RETICULARES**

Fuertemente acopladas

Modos normales

Deslocalizadas

# MODELO DE DEBYE

## HIPÓTESIS

Las partículas reticulares forman un sistema tridimensional de osciladores acoplados

Las frecuencias normales del sistema se encuentran en el rango  $0 \leq \omega \leq \omega_D$

$\omega_D \equiv$  Frecuencia de Debye

El sólido se comporta como un medio **no dispersivo**

$$\omega(\vec{k}) = v_s k$$

Las energías del sistema están cuantizadas en unidades de  $\hbar\omega$

## DENSIDAD DE MODOS $D(\vec{k})$

$$D(\mathbf{k}) = \frac{3V}{8\pi^3}$$

## DENSIDAD DE MODOS $D(\omega)$

$$D(\omega)d\omega = \frac{3V}{8\pi^3} 4\pi k^2 dk$$

$$D(\omega) = \frac{3V}{2\pi^2 v_s^3} \omega^2$$

$$3N = \int_0^{\omega_D} D(\omega)d\omega = \frac{V}{2\pi^2 v_s^3} \omega_D^3$$

$$\omega_D = (6\pi^2 n)^{1/3} v_s$$

$$k_D \text{ (vector de onda de Debye)} = (6\pi^2 n)^{1/3}$$

$$T_D \text{ (temperatura de Debye)} = \frac{\hbar\omega_D}{k_B}$$

$$D(\omega) = \frac{9N}{\omega_D} \left( \frac{\omega}{\omega_D} \right)^2$$

# MODELO DE DEBYE

## Energía del subsistema reticular

$$E(T) = \int_0^{\omega_D} \hbar\omega D(\omega)n(\omega, T)d\omega$$

$$n(\omega, T) = \frac{1}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} \quad \text{Distribución de Planck}$$

$$E(T) = \frac{9N\hbar}{\omega_D^3} \int_0^{\omega_D} \frac{\omega^3 d\omega}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1}$$

## Calor específico reticular

$$c_v^{ret} = \frac{\partial \left( \frac{E}{V} \right)}{\partial T} = \frac{9k_B N}{\omega_D^3 V} \left( \frac{\hbar}{k_B T} \right)^2 \int_0^{\omega_D} \frac{\omega^4 e^{\hbar\omega/k_B T} d\omega}{(e^{\hbar\omega/k_B T} - 1)^2}$$

$$x = \frac{\hbar\omega}{k_B T}$$

$$c_v^{ret} = 9k_B \frac{N}{V} \left( \frac{T}{T_D} \right)^3 \int_0^{T_D/T} \frac{x^4 e^x dx}{(e^x - 1)^2}$$

## Límite de alta temperatura ( $T \gg T_D$ )

$$(e^x - 1)^{-2} = \left( 1 + x + \frac{1}{2}x^2 + \dots - 1 \right)^{-2} = \\ = \frac{1}{x^2} \left( 1 + \frac{1}{2}x + \dots \right)^{-2} \approx \frac{1}{x^2}$$

$$\lim_{T \gg T_D} c_v^{ret} = 3nk_B$$

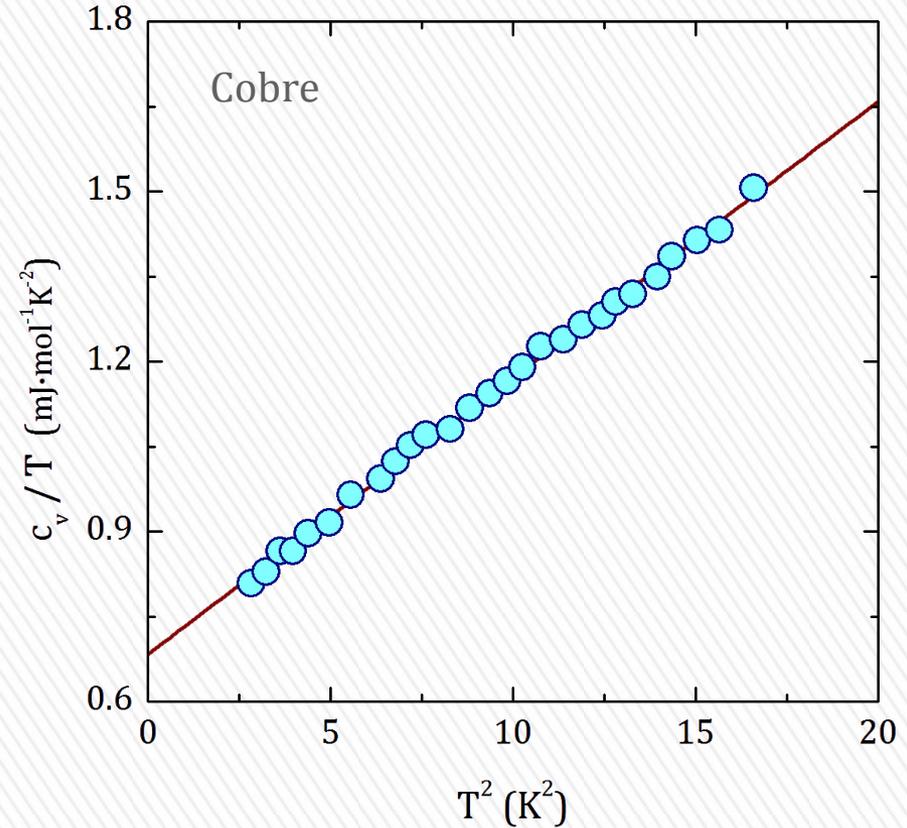
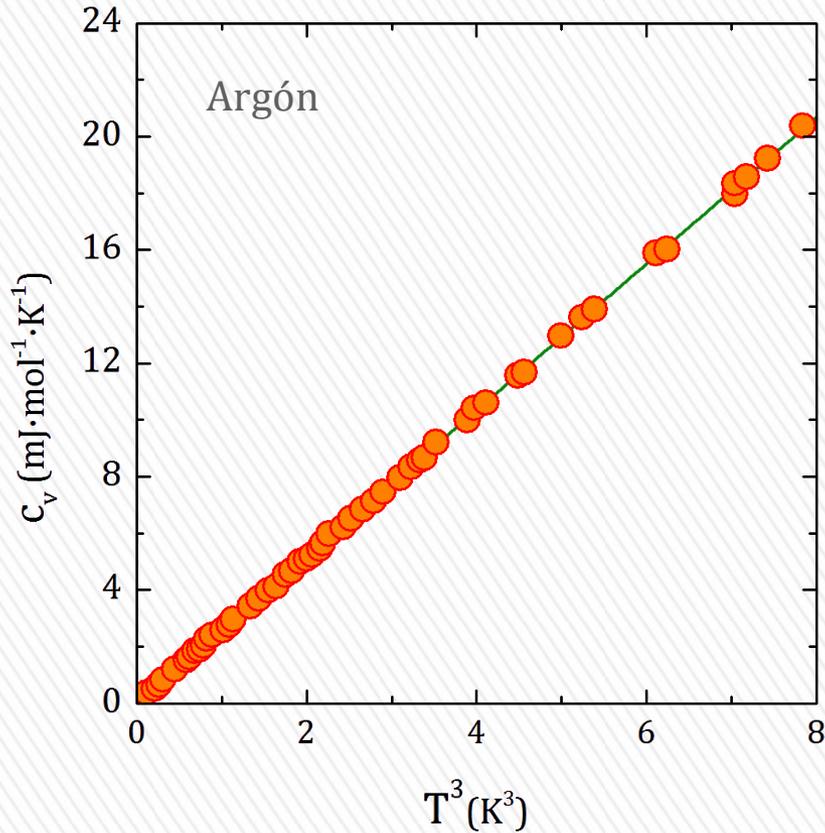
Ley de Dulong y Petit

## Límite de baja temperatura ( $T \ll T_D$ )

$$\frac{T_D}{T} \rightarrow \infty \quad \int_0^{\infty} \frac{x^4 e^x dx}{(e^x - 1)^2} = \frac{4\pi^4}{15}$$

$$\lim_{T \ll T_D} c_v^{ret} = \frac{12\pi^4}{5} nk_B \left( \frac{T}{T_D} \right)^3$$

# MODELO DE DEBYE

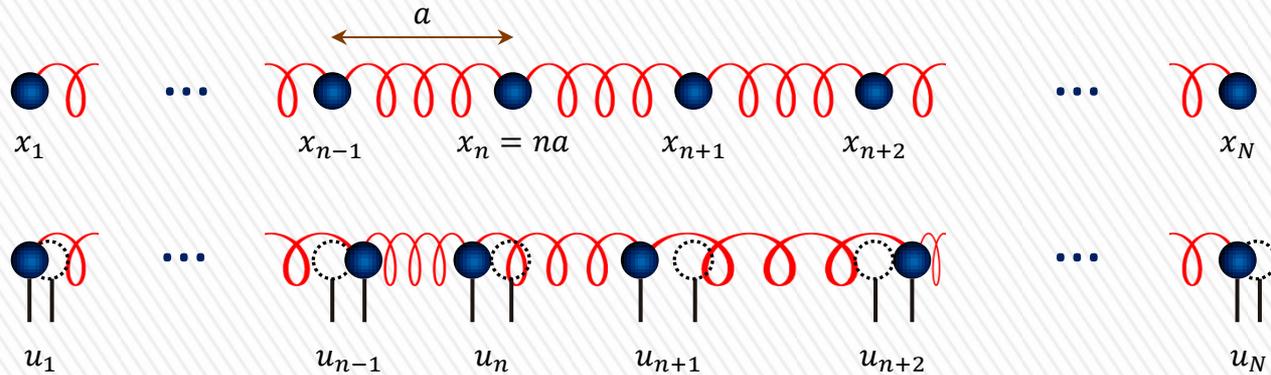


EXTRAORDINARIO BUEN ACUERDO

$$c_v^{ret} = AT^3 + \gamma T$$

A temperaturas intermedias, el modelo de Debye **no es válido porque ignora el carácter discreto de los sólidos**

# CADENA LINEAL MONOATÓMICA



$$F(x_n) = - \sum_{p>0} C_p [(u_n - u_{n+p}) + (u_n - u_{n-p})]$$

$$u_1 = u_N$$

CC periódicas

$$m \frac{d^2 u_n}{dt^2} = - \sum_{p>0} C_p [(u_n - u_{n+p}) + (u_n - u_{n-p})]$$

**Aproximación de primeros vecinos**

$$m \frac{d^2 u_n}{dt^2} = C(u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n)$$

# CADENA LINEAL MONOATÓMICA

Ondas planas como soluciones

$$u_n(x_n, t) = u e^{i(kx_n - \omega t)}$$

$$u_{n\pm 1}(x_{n\pm 1}, t) = u_n e^{\pm ika}$$

CC periódicas



$$k = \frac{2\pi}{N_c a} m \quad m \in \mathbb{Z}$$

Densidad de estados

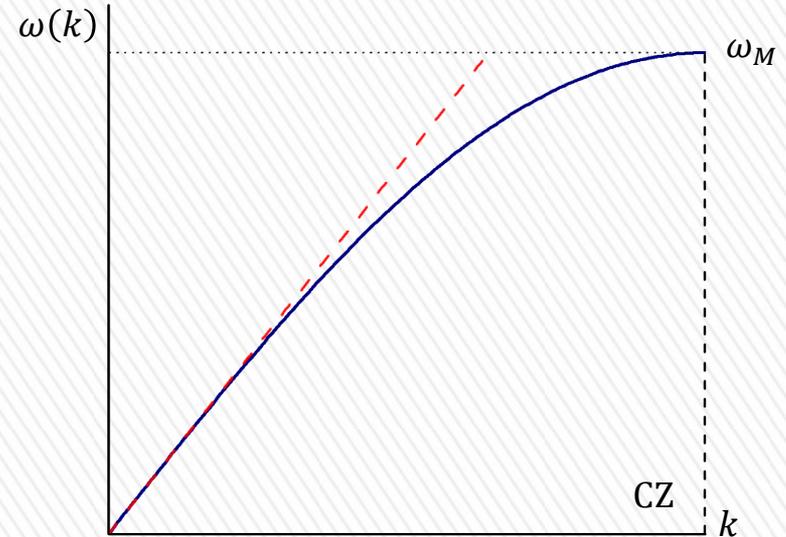
$$D(k) = \frac{L}{2\pi}$$

$$-m\omega^2 = C(e^{ika} + e^{-ika} - 2) = 2C(\cos ka - 1)$$

$$\omega^2 = \frac{2C}{m}(1 - \cos ka)$$

$$\omega(k) = 2 \sqrt{\frac{C}{m}} \left| \text{sen} \frac{ka}{2} \right|$$

Relación de dispersión



- ✓ Comportamiento **dispersivo**
- ✓ Existe una **frecuencia máxima**, que se alcanza en el contorno de zona

$$\omega_M = \omega(k = \pi/a) = 2\sqrt{C/m}$$

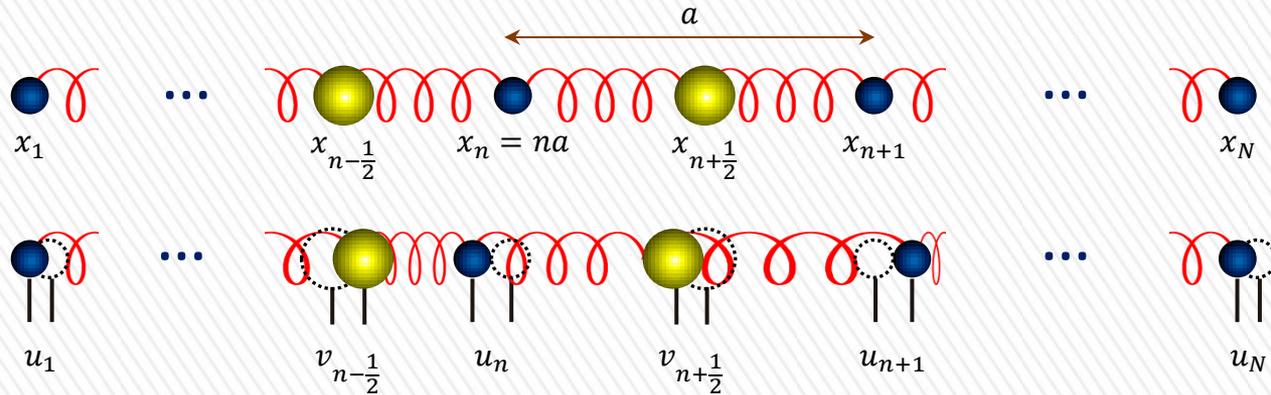
- ✓ El modo en CZ es **estacionario**

- ✓ En el límite  $k \rightarrow 0$ :

$$\omega(k) \approx \frac{a}{2} \omega_M k \equiv v_s k$$

- ✓ Número total de modos =  $N_c$

# CADENA LINEAL DIATÓMICA



## Aproximación de primeros vecinos

$$m_1 \frac{d^2 u_n}{dt^2} = C(v_{n+\frac{1}{2}} + v_{n-\frac{1}{2}} - 2u_n) \quad m_2 \frac{d^2 v_{n+\frac{1}{2}}}{dt^2} = C(u_{n+1} + u_n - 2v_{n+\frac{1}{2}}) \quad m_2 > m_1$$

## CC periódicas

$$u_n(t) = u e^{i(kx_n - \omega t)} = u e^{i(kna - \omega t)}$$

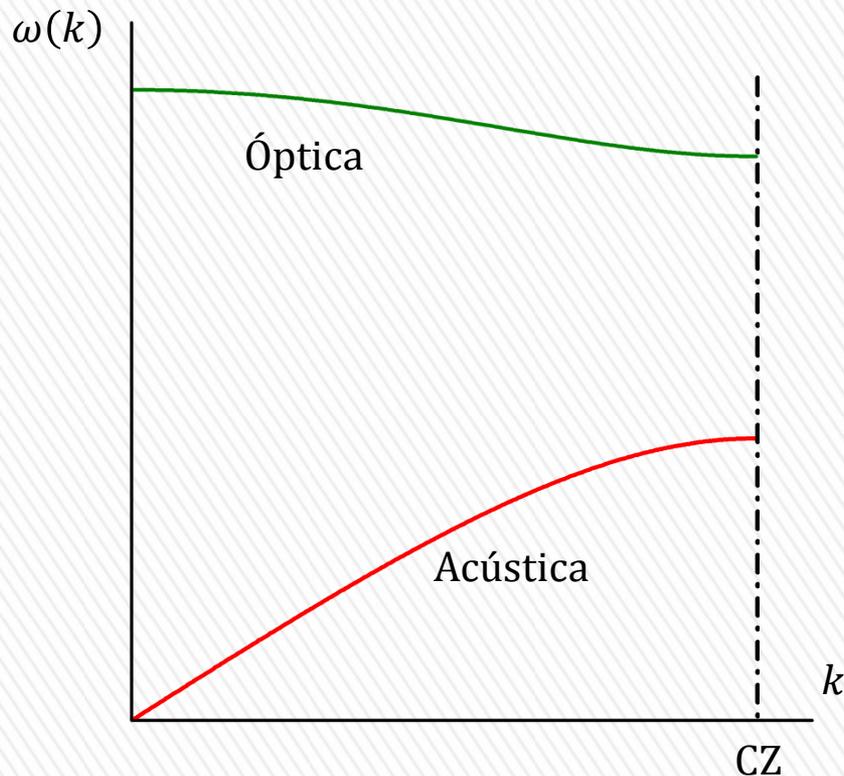
$$v_{n\pm\frac{1}{2}}(t) = v e^{i(kna - \omega t)} e^{\pm \frac{ika}{2}}$$

$$\left. \begin{aligned} (m_1 \omega^2 - 2C)u + 2C \cos \frac{ka}{2} v &= 0 \\ 2C \cos \frac{ka}{2} u + (m_2 \omega^2 - 2C)v &= 0 \end{aligned} \right\}$$

# CADENA LINEAL DIATÓMICA

$$\omega = \left\{ \frac{C(m_1 + m_2)}{m_1 m_2} \left[ 1 \pm \sqrt{1 - \frac{4m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} \text{sen}^2 \frac{ka}{2}} \right] \right\}^{1/2}$$

Relación de dispersión



Comportamiento **dispersivo**

**Rama acústica**

$$\omega^{ac}(k=0) = 0$$

**Rama óptica**

$$\omega^{op}(k=0) \neq 0$$

# CADENA LINEAL DIATÓMICA

## Rama acústica

- ✓ Existe una **frecuencia máxima**, que se alcanza en el contorno de zona

$$\omega_M^{ac} = \sqrt{2C/m_2}$$

- ✓ Velocidad de grupo de los modos acústicos

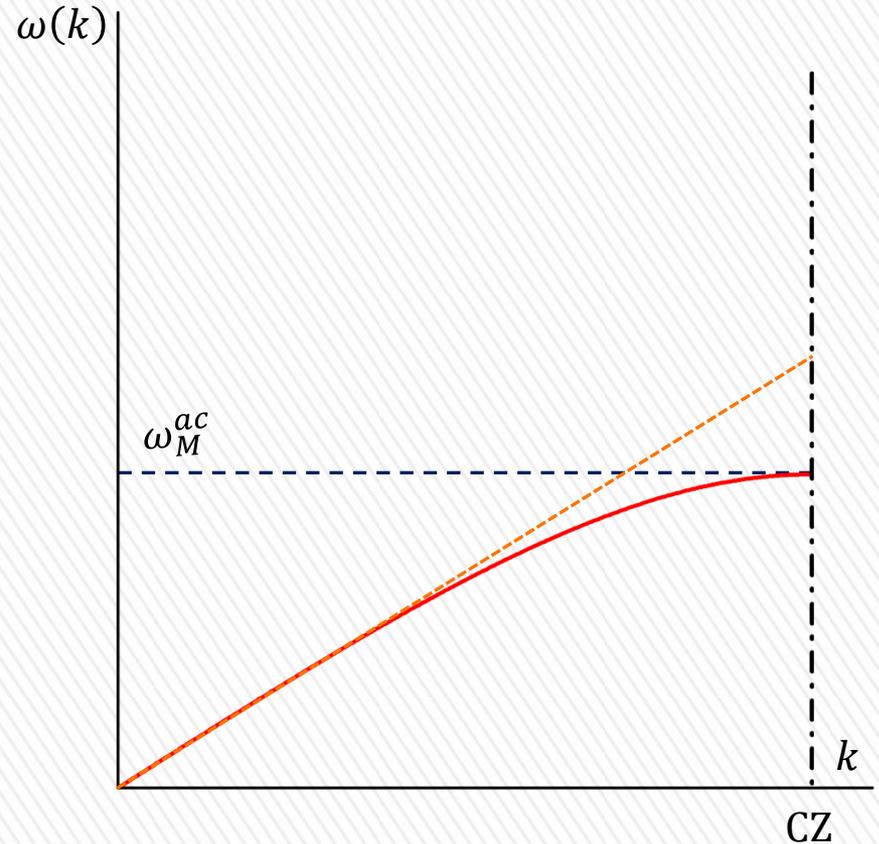
$$v_g^{ac}(k) = \frac{1}{2\omega^{ac}(k)} \frac{aC}{m_1 + m_2} \frac{\text{sen } ka}{\sqrt{1 - \frac{4m_1m_2}{(m_1 + m_2)^2} \text{sen}^2 \frac{ka}{2}}}$$

- ✓ El modo en CZ es **estacionario**

- ✓ En el límite  $k \rightarrow 0$ :

$$\omega(k) \approx \sqrt{\frac{C}{2(m_1 + m_2)}} ak$$

- ✓ Número total de modos =  $N_c$



# CADENA LINEAL DIATÓMICA

## Rama óptica

- ✓ Existe una **frecuencia máxima**, que se alcanza en  $k = 0$ .

$$\omega_M^{\acute{o}p} = \sqrt{\frac{2C(m_1 + m_2)}{m_1 m_2}}$$

- ✓ Existe una **frecuencia mínima**, que se alcanza en CZ.

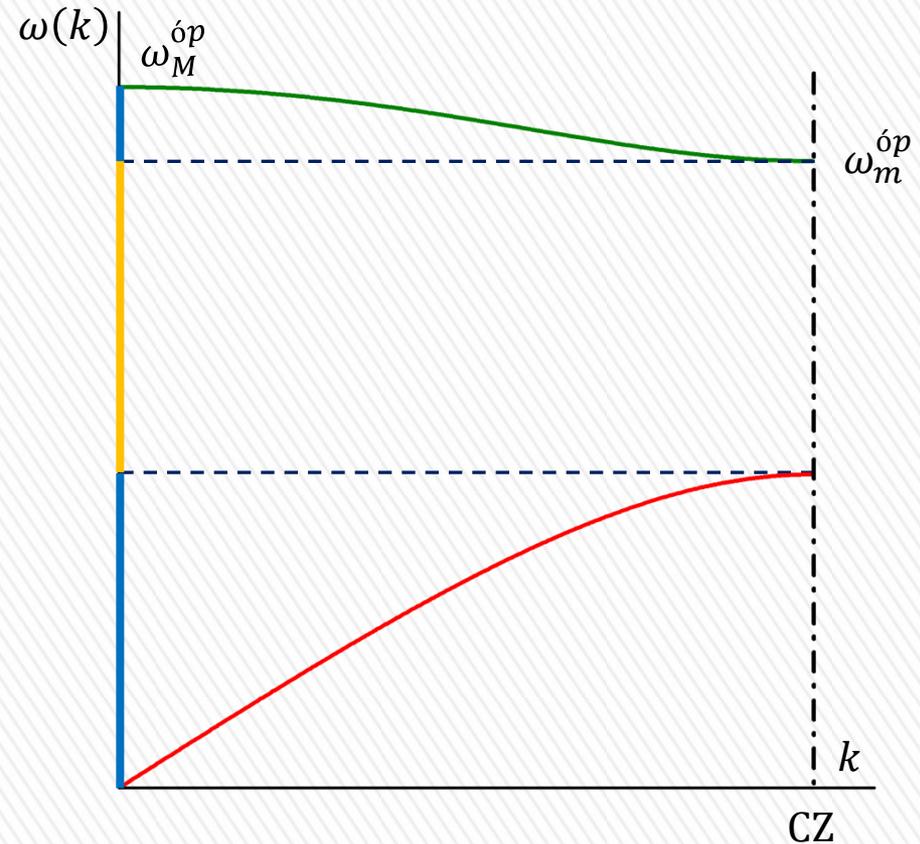
$$\omega_m^{\acute{o}p} = \sqrt{2C/m_1}$$

- ✓ Velocidad de grupo de los modos ópticos

$$v_g^{\acute{o}p}(k) = -\frac{1}{2\omega^{\acute{o}p}(k)} \frac{aC}{m_1 + m_2} \frac{\text{sen } ka}{\sqrt{1 - \frac{4m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} \text{sen}^2 \frac{ka}{2}}}$$

- ✓ Los modos en  $k = 0$  y CZ son **estacionarios**

- ✓ Número total de modos =  $N_c$



$$\Delta\omega = \sqrt{2C} \left( \frac{1}{\sqrt{m_1}} - \frac{1}{\sqrt{m_2}} \right)$$

# ESPECTRO GENERAL DE VIBRACIÓN

Sólido con  $N_c$  celdas, cada una de ellas con  $r$  átomos, oscilando en las tres direcciones del espacio

$$U(\vec{r}) = \frac{1}{2} \sum_{pq} \frac{\partial^2 U(\vec{r})}{\partial \vec{r}_p \partial \vec{r}_q} \Big|_{\vec{r}_0} u_p(\vec{r}) u_q(\vec{r}) = \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}, \alpha, i} \sum_{\vec{m}, \beta, j} C_{\vec{n}, \alpha, i}^{\vec{m}, \beta, j} u_{\vec{n}, \alpha, i} u_{\vec{m}, \beta, j} \quad C_{\vec{n}, \alpha, i}^{\vec{m}, \beta, j} = \frac{\partial^2 U(\vec{r})}{\partial r_{\vec{n}, \alpha, i} \partial r_{\vec{m}, \beta, j}} \Big|_{\vec{r}_0}$$

Componente  $i$  de la fuerza sobre el átomo  $\alpha$  de la celda  $\vec{n}$  debida al desplazamiento en la dirección  $i$  del átomo  $\beta$  de la celda  $\vec{m}$

$$F_{\vec{n}, \alpha, i}^{\vec{m}, \beta, j} = -C_{\vec{n}, \alpha, i}^{\vec{m}, \beta, j} u_{\vec{m}, \beta, j}$$

Componente  $i$  de la fuerza total sobre el átomo  $\alpha$  de la celda  $\vec{n}$

$$F_{\vec{n}, \alpha, i} = - \sum_{\vec{m}, \beta, j} C_{\vec{n}, \alpha, i}^{\vec{m}, \beta, j} u_{\vec{m}, \beta, j}$$

$$m_\alpha \frac{d^2 u_{\vec{n}, \alpha, i}}{dt^2} + \sum_{\vec{m}, \beta, j} C_{\vec{n}, \alpha, i}^{\vec{m}, \beta, j} u_{\vec{m}, \beta, j} = 0$$

Soluciones de onda plana

$$u_{\vec{n}, \alpha, i} = \frac{1}{\sqrt{m_\alpha}} u_{\alpha, i}(\vec{k}) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r}_{\vec{n}, \alpha} - \omega t)}$$

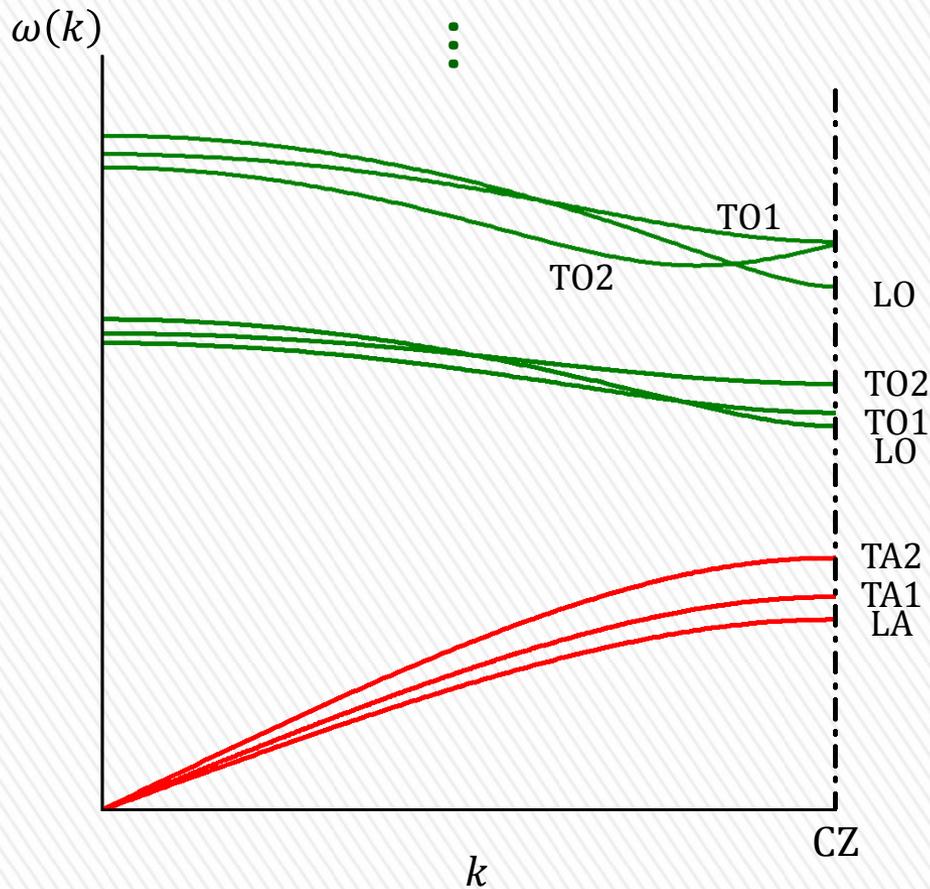
$$-\omega^2 u_{\alpha, i}(\vec{k}) + \sum_{\beta, j} D_{\alpha, i}^{\beta, j}(\vec{k}) u_{\beta, j}(\vec{k}) = 0$$

(3r ecuaciones)

$$D_{\alpha, i}^{\beta, j}(\vec{k}) = \frac{1}{\sqrt{m_\alpha m_\beta}} \sum_{\vec{m}} C_{\vec{n}, \alpha, i}^{\vec{m}, \beta, j} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r}_{\vec{m}, \beta} - \vec{r}_{\vec{n}, \alpha})}$$

$$\text{Det} \left\{ D_{\alpha, i}^{\beta, j}(\vec{k}) - \omega^2 \mathbb{I} \right\} = 0$$

# ESPECTRO GENERAL DE VIBRACIÓN



3 ramas acústicas  $\rightarrow 3N_c$  modos

$3r - 3$  ramas ópticas  $\rightarrow 3(r-1)N_c$  modos

$3rN_c$  modos

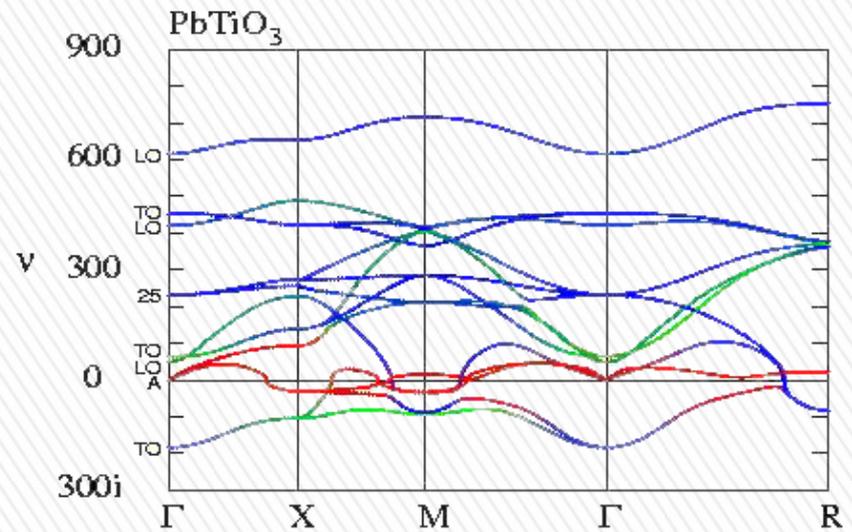
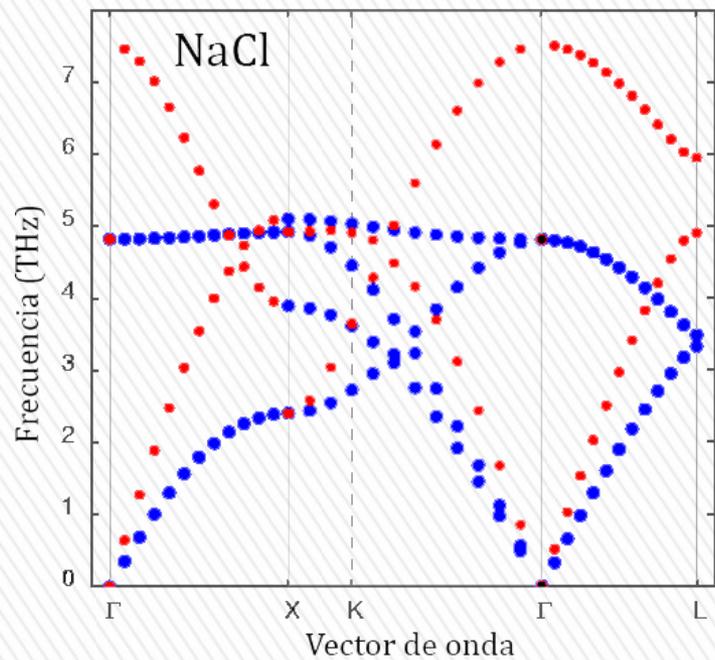
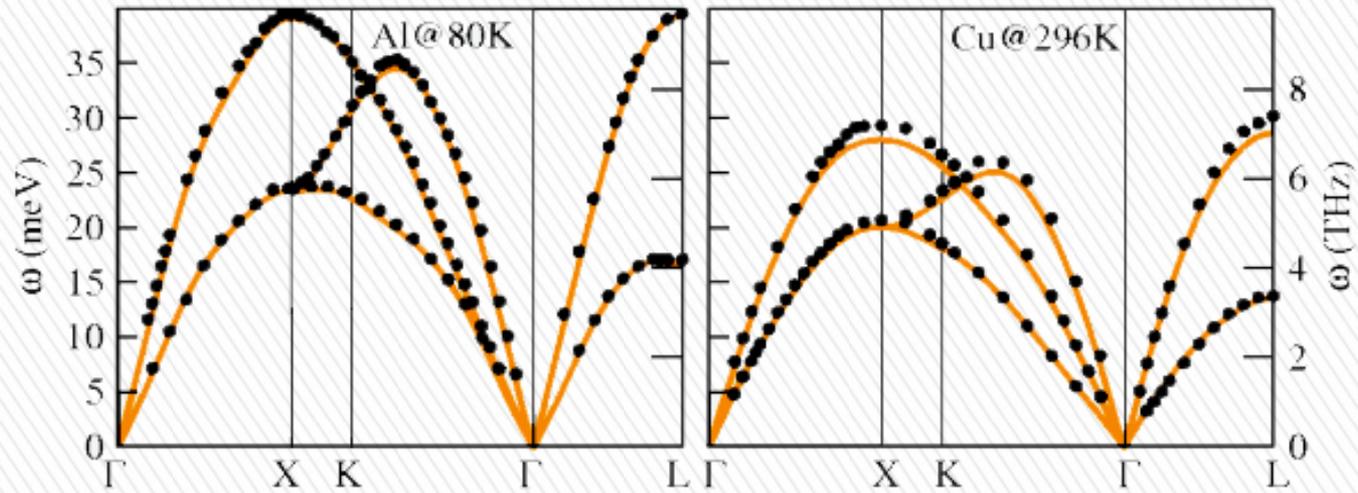
Longitudinales

1 acústica  
r - 1 ópticas

Transversales

2 acústicas  
 $2r - 2$  ópticas

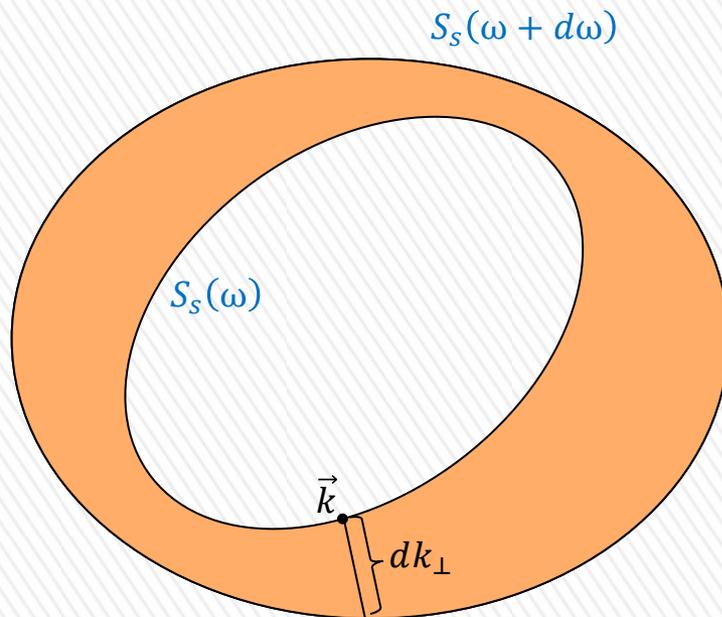
# EJEMPLOS



# DENSIDAD DE MODOS DE VIBRACIÓN

DENSIDAD DE MODOS  $D_s(\omega)$

$D_s(\omega)d\omega$  es el número de modos de vibración con frecuencias entre  $\omega$  y  $\omega + d\omega$  en la rama  $s$ .



$$D_s(\omega)d\omega = D(\vec{k})dV^* = \frac{V}{8\pi^3} \int_{S_s(\omega)} dS dk_{\perp}$$

$$d\omega = \vec{\nabla}_{\vec{k}} \omega_s(\vec{k}) \cdot d\vec{k} = |\vec{\nabla}_{\vec{k}} \omega_s(\vec{k})| dk_{\perp}$$

$$dk_{\perp} = \frac{d\omega}{|\vec{\nabla}_{\vec{k}} \omega_s(\vec{k})|}$$

$$D_s(\omega) = \frac{V}{8\pi^3} \int_{S_s(\omega)} \frac{dS}{|\vec{\nabla}_{\vec{k}} \omega_s(\vec{k})|}$$

# FONONES: ENERGÍA Y MOMENTO CRISTALINO

Mecánica Cuántica

La misma relación de dispersión, pero **distintas energías**.

$$\varepsilon_{Clásica} = \frac{1}{2} m \omega^2 A^2$$

$$\varepsilon_{Cuántica} = \left( n_s(\omega) + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega$$

Principio de dualidad



**FONÓN**

Bosón virtual asociado a las vibraciones reticulares en un sólido

Momento cristalino

$$\vec{p} = \hbar \vec{k}$$

**NO ES EL MOMENTO**, puesto que  
 $\vec{k} \equiv \vec{k} + \vec{G}$

Energía

$$\varepsilon_s(\vec{k}) = \hbar \omega_s(\vec{k})$$

**POBLACIÓN DE FONONES**

Modo normal en el estado excitado  $n_s(\vec{k})$

$$\varepsilon = \left( n_s(\vec{k}) + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega$$



$n_s(\vec{k})$  fonones con energía  
 $\hbar \omega_s(\vec{k})$

$$n_s(\vec{k}, T) = \frac{1}{e^{\hbar \omega_s(\vec{k})/k_B T} - 1}$$

Distribución de Planck