




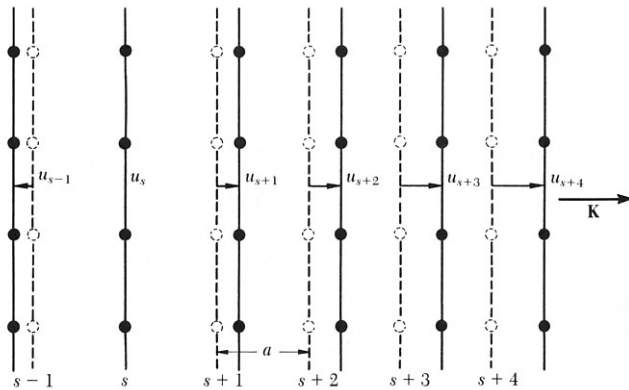


Fonones: *Cuantización* de las vibraciones de la red cristalina.

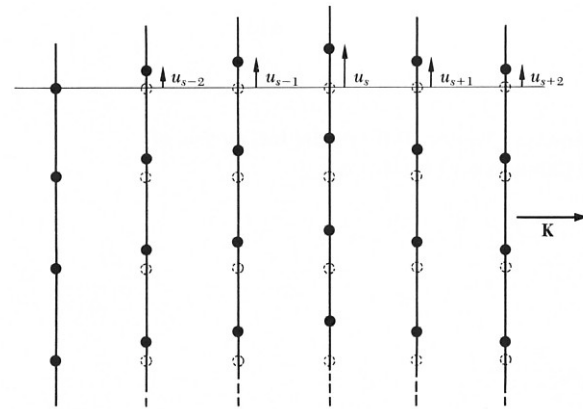
Onda de longitud larga $\rightarrow k \approx 0 \rightarrow$ Ondas elásticas...

Ondas de longitud corta $\lambda \approx a$ o $k \approx \pi/a \rightarrow$ tenemos que tener en cuenta la estructura atómica del cristal.

	Name	Field
	Electron	—
	Photon	Electromagnetic wave
	Phonon	Elastic wave
	Plasmon	Collective electron wave
	Magnon	Magnetization wave
—	Polaron	Electron + elastic deformation
—	Exciton	Polarization wave



fonón longitudinal



fonón transversal

Base monoatómica: Consideremos que las interacciones son elásticas, con constantes que dependerán de la dirección de propagación y la polarización de la onda. Las fuerzas son proporcionales al desplazamiento y consideramos sólo interacciones entre planos vecinos. La fuerza sobre un átomo del plano s viene de los planos $s+1$ y $s-1$:

$$F_s = C (u_{s+1} - u_s) + C (u_{s-1} - u_s)$$

La ecuación del movimiento para el átomo:

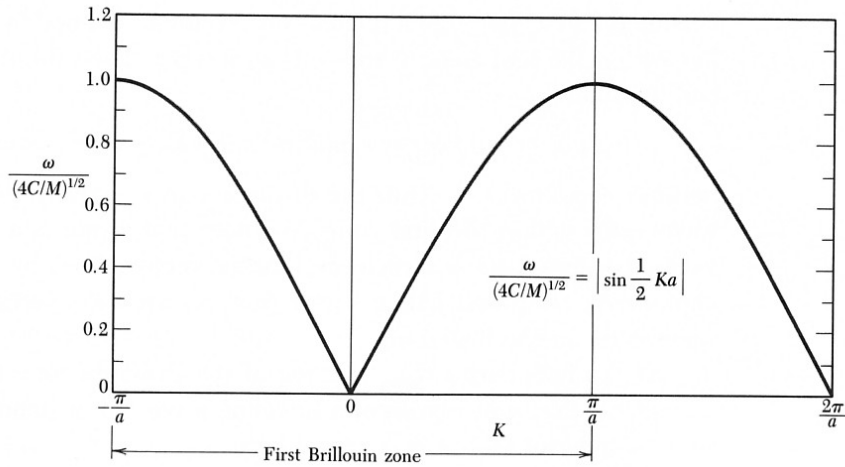
$$M \frac{d^2 u_s}{dt^2} = C(u_{s+1} + u_{s-1} - 2u_s)$$

Una onda viajando en la dirección K (perpendicular al plano) es:

$$u_s = u_0 \exp(iKsa - i\omega t) \quad \text{y por tanto} \quad u_{s\pm 1} = u_s e^{\pm iKa}$$

Sustituyendo queda: $-M\omega^2 = C [\exp(iKa) + \exp(-iKa) - 2]$ y por tanto:

$$\omega^2 = (2C/M)(1 - \cos Ka)$$



La solución no cambia si $K \rightarrow K \pm n \frac{2\pi}{a}$.
 Luego $-\pi/a < K < \pi/a$.(1ª Zona de Brillouin).

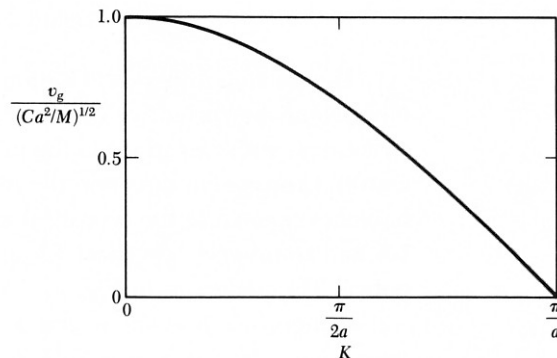
$K_{\max} = \pi/a$ es una onda estacionaria.

Velocidad de grupo de las ondas: $v_g = d\omega/dK$ o $v_g = \text{grad}_K \omega(K)$.

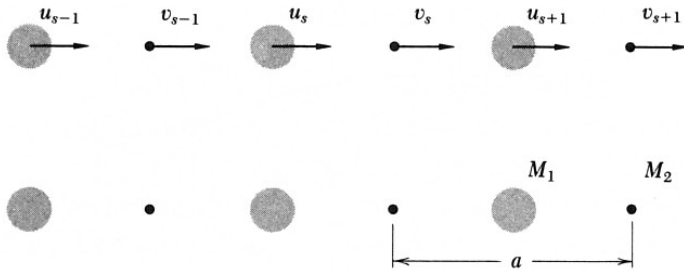
Para la relación de dispersión que hemos visto $v_g(K) = (Ca^2/M)^{1/2} \cos(1/2 Ka)$.

En $K = \pi/a$, $v_g = 0$.

Límite continuo: si $Ka \ll 1$ $\omega^2 = (C/M)K^2a^2$. $(Ca^2/M)^{1/2} =$ velocidad ondas elásticas.



Base diatómica: En general si hay p átomos por celda unidad, hay $3p$ ramas en la relación de dispersión. 3 ramas acústicas y $3p - 3$ ópticas (en 3 dimensiones). Veamos cómo se obtienen.



$$M_1 \frac{d^2 u_s}{dt^2} = C(v_s + v_{s-1} - 2u_s)$$

$$M_2 \frac{d^2 v_s}{dt^2} = C(u_{s+1} + u_s - 2v_s)$$

Probemos soluciones de la forma $u_s = u \exp(isKa - i\omega t)$ y $v_s = v \exp(isKa - i\omega t)$.
Sustituyendo obtenemos:

$$-\omega^2 M_1 u = Cv[1 + \exp(-iKa)] - 2Cu ;$$

$$-\omega^2 M_2 v = Cu[\exp(iKa) + 1] - 2Cv .$$

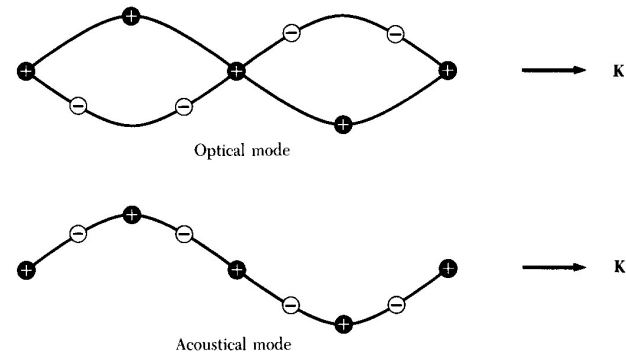
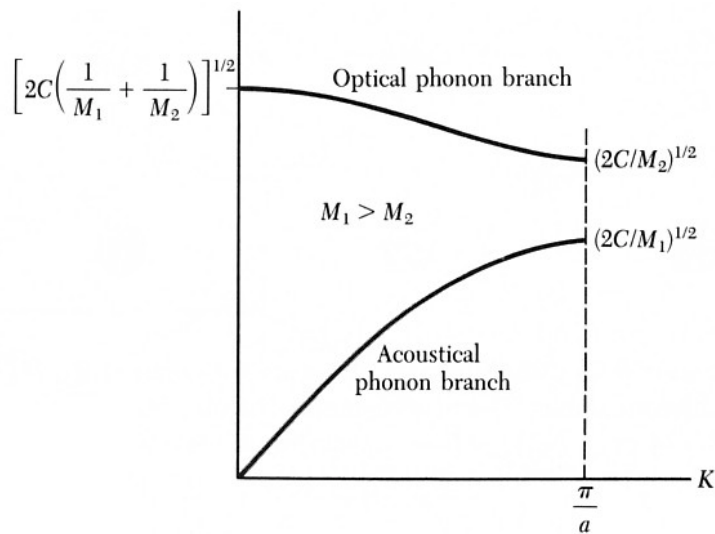
Este sistema tiene solución si:

$$\begin{vmatrix} 2C - M_1\omega^2 & -C[1 + \exp(-iKa)] \\ -C[1 + \exp(iKa)] & 2C - M_2\omega^2 \end{vmatrix} = 0 ,$$

$M_1M_2\omega^4 - 2C(M_1 + M_2)\omega^2 + 2C^2(1 - \cos Ka) = 0$. para $Ka \ll 1$ tenemos

$\omega^2 \cong 2C\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2}\right)$ (optical branch) ; $u/v = -(M_2/M_1)$ $K=0$

$\omega^2 \cong \frac{\frac{1}{2}C}{M_1 + M_2}K^2a^2$ (acoustical branch) . $u=v$ $K=0$



La estructura de las relaciones de dispersión es en general complicada:

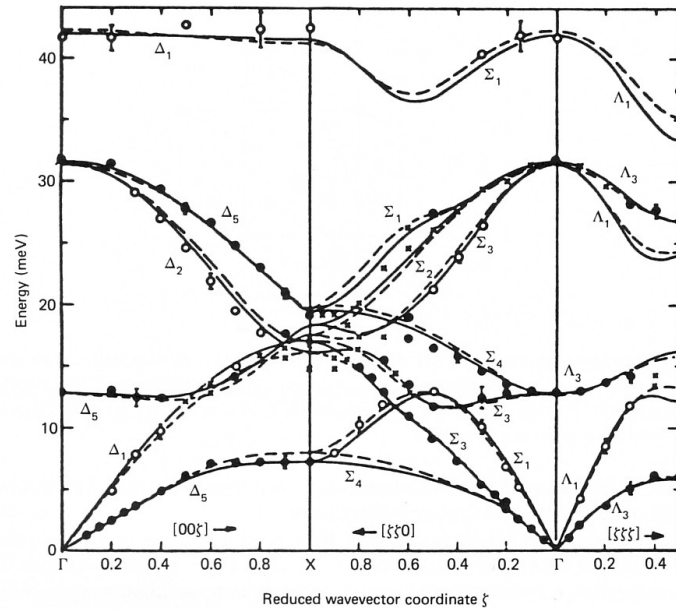


Fig. 19. Observed and calculated phonon dispersion in PbF_2 at 10 K (from Dickens and Hutchings, 1978).

“Cuantización” de las ondas elásticas:

Las ondas elásticas son osciladores armónicos que están cuantizados y se les asocian partículas (**FONÓN**). La energía es por tanto:

$$E_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega.$$

Esto implica que la amplitud de las ondas está cuantizada.

$$\langle E \rangle = \frac{1}{4} \rho V \omega^2 u_0^2 = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega. \Rightarrow u_0^2 = 4(n + \frac{1}{2}) \hbar / \rho V \omega.$$

El momento del fonón :

Una onda elástica o fonón no transporta momento lineal, sin embargo los fonones se comportan como si su momento fuera $P = \hbar K$. En procesos de colisión, creación y destrucción, se conserva el momento lineal.

Propiedades Térmicas:

Las ondas elásticas o fonones determinan gran parte de las propiedades térmicas:

Calor Específico.

Conductividad Térmica.

Energía Interna de las ondas elásticas a temperatura T:

$$U = \sum_K \sum_p \langle U_{K,p} \rangle_T = \sum_K \sum_p \langle n_{K,p} \rangle_T \hbar \omega_{K,p}$$

¿Cómo se hacen las sumas en K?

¿Cuánto vale la contribución a la energía media de un onda de frecuencia $\omega(k)$?

¿Cuánto vale el número medio de *fonones* a temperatura T?

Distribución de Planck (en otro contexto Bose-Einstein):

La probabilidad de que un oscilador esté en un estado de energía E_n :

$P(E_n) = (1/Z) \exp(-E_n/k_B T)$ donde $Z(T)$ es una constante de normalización.

Se tiene que cumplir que $\sum_n P(E_n) = 1$. Luego $Z = \sum_n \exp(-E_n/k_B T)$.

Las distintas energías en los que puede estar un oscilador de frecuencia $\omega(k)$ son $E_n = (n + 1/2) \hbar \omega$. La función Z es por tanto,

$$Z(T) = \sum_{n=0}^{\infty} \exp[-(n + 1/2)\hbar\omega_K / k_B T] = e^{-\hbar\omega/2k_B T} \frac{1}{1 - e^{-\hbar\omega_K/k_B T}}$$

La contribución de la onda elástica a la energía media es:

$$\langle U_K \rangle = \sum_n (n + 1/2) \hbar \omega_K P(E_n) = (1/Z) \sum_n (n + 1/2) \hbar \omega_K e^{-(n+1/2)\hbar\omega/k_B T}$$

$$\begin{aligned}
\langle U_K \rangle &= \left(1 - e^{-\hbar\omega/k_B T}\right) \sum_n \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_K e^{-n\hbar\omega/k_B T} = \\
&= \frac{1}{2} \hbar\omega_k + \left(1 - e^{-\hbar\omega/k_B T}\right) \sum_n n \hbar\omega_K e^{-n\hbar\omega/k_B T} = \\
&= \frac{1}{2} \hbar\omega_k + \left(1 - e^{-\hbar\omega/k_B T}\right) \frac{\hbar\omega_K e^{-\hbar\omega/k_B T}}{\left(1 - e^{-\hbar\omega/k_B T}\right)^2} = \\
&= \frac{1}{2} \hbar\omega_k + \hbar\omega_K \frac{1}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} = \frac{1}{2} \hbar\omega_k + \hbar\omega_K \langle n(\omega_K) \rangle
\end{aligned}$$

$$\langle n(E) \rangle = \frac{1}{e^{E/k_B T} - 1}$$

Distribución de Planck (Bose-Einstein)

La energía interna queda entonces :

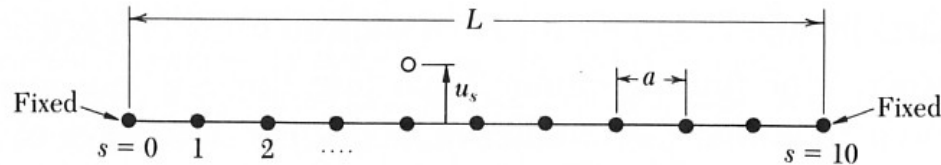
$$U = \sum_p \sum_K \frac{\hbar\omega_{K,p}}{e^{\hbar\omega_{K,p}/k_B T} - 1} + \frac{1}{2} \sum_K \sum_p \hbar\omega$$

El calor específico se obtiene como :

$$C_V = \frac{\partial U}{\partial T} = k_B \sum_p \sum_K \frac{(\hbar\omega_{K,p} / k_B T)^2 e^{\hbar\omega_{K,p} / k_B T}}{(e^{\hbar\omega_{K,p} / k_B T} - 1)^2}$$

Sólo nos queda por ver cómo sumamos en K.

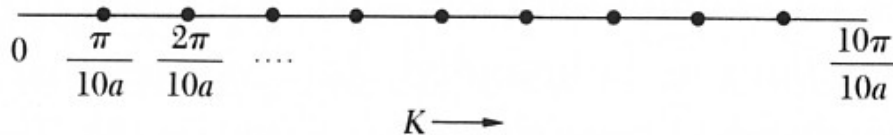
Enumeración de modos normales (K). Ya hemos visto que sólo tienen sentido los modos dentro de la 1ªZB. Impongamos ahora condiciones de contorno (N+1 partículas con:



Condiciones fijas: $u_0 = 0$ y $u_{N+1} = 0$. Para que cumplan esas condiciones se deben formar ondas estacionarias: $u_s = u_0 \sin(sKa) \exp(i\omega t)$. Las K permitidas son cumplan $\sin(NKa) = 0$ y son

$$K = \frac{\pi}{L}, \frac{2\pi}{L}, \frac{3\pi}{L}, \dots, \frac{(N-1)\pi}{L}.$$

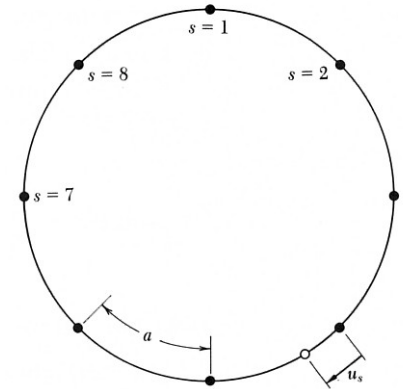
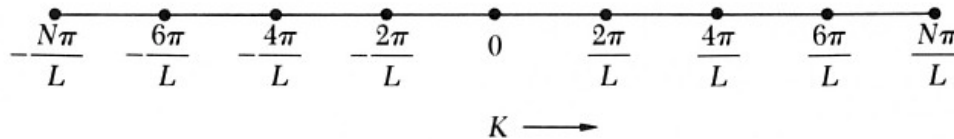
Tenemos por tanto N-1 modos distintos entre 0 y π/a .



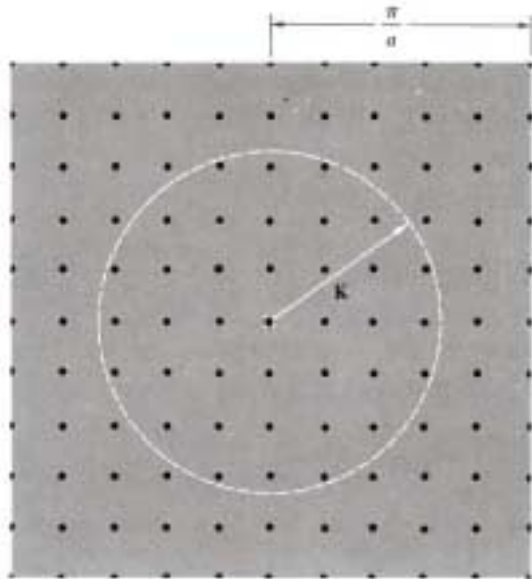
La densidad de modos es (N grande)
 $D(K) = Na/\pi = L/\pi$.

Condiciones periódicas: Imponemos que $u_{s+N} = u_s$. Esto nos restringe a aquellas K entre $-\pi/a$ y π/a tales que $KNa = \pm m 2\pi$ o $K = \pm m 2\pi / L$.

$$K = 0, \quad \pm \frac{2\pi}{L}, \quad \pm \frac{4\pi}{L}, \quad \pm \frac{6\pi}{L}, \quad \dots, \quad \frac{N\pi}{L}.$$



Tenemos N modos distintos entre $-\pi/a$ y π/a luego la densidad es $D(K) = L/2\pi$.



En dos dimensiones : N^2 modos en una ZB de superficie $(2\pi/a)^2$. Luego $D(K) = L^2 / 4\pi^2$.

En tres dimensiones : N^3 modos en una ZB de volumen $(2\pi/a)^3$. Luego $D(K) = L^3 / 8\pi^3$.

Si $N = L/a$ es grande (que lo es) podemos sustituir las sumas en K por integrales:

$$\text{En 3d } \sum_K F(K) \rightarrow \int_{ZB} F(K) D(K) dV(K)$$

Densidad de estados en frecuencias $D(\omega)$: Es el número de estados (modos) que tenemos por unidad de frecuencia . Si conocemos la relación de dispersión $\omega(K)$ es fácil relacionarla con $D(K)$ (al menos en este caso).

$$\text{número de estados } dN = D(\omega) d\omega = D(K) dV(K)$$

En 3d $dV(K) = dK_x dK_y dK_z$ o $= 4\pi K^2 dK$, luego si la frecuencia solo depende del módulo de K tenemos

$$D(\omega) = D(K) 4\pi K^2 dK/d\omega = (VK^2/2\pi^2) (dK/d\omega) \text{ donde } V = L^3.$$

Modelo de Debye:

1.- Asumimos la relación de dispersión de las ondas elásticas $\omega(\mathbf{K}) = v \mathbf{K}$. Esto implica que la densidad de estados es $D(\omega) = V\omega^2 / 2\pi^2 v^3$.

2.- El número de estados por polarización es N (número de celdas unidad). Tenemos entonces una frecuencia máxima ω_D .

$$N = \int_0^{\omega_D} D(\omega) d\omega \quad \Rightarrow \quad \omega_D^3 = 6\pi^2 v^3 N / V$$

Que implica un vector de ondas máximo: $K_D = \omega_D / v = (6\pi^2 N/V)^{1/3}$. Daros cuenta que $(V/N)^{1/3} \approx a$.

Tomemos una velocidad de propagación “promedio”:

$$\frac{3}{v^3} = \frac{1}{v_L^3} + \frac{2}{v_T^3}$$

$$\sum_p D_p(\omega) = \frac{V\omega^2}{2\pi^2} \left(\frac{1}{v_L^3} + \frac{2}{v_T^3} \right) = \frac{3V\omega^2}{2\pi^2 v^3}$$

La energía interna queda:

$$\begin{aligned} U &= \sum_p \int_0^{\omega_D} \langle U(\omega) \rangle_T D(\omega) d\omega = \int_0^{\omega_D} d\omega \left(\frac{3V\omega^2}{2\pi^2 v^3} \right) \left(\frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} \right) = \\ &= \frac{3V\hbar}{2\pi^2 v^3} \int_0^{\omega_D} d\omega \frac{\omega^3}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} = \frac{3Vk_B^4 T^4}{2\pi^2 v^3 \hbar^3} \int_0^{x_D} dx \frac{x^3}{e^x - 1} \end{aligned}$$

Donde hemos definido $x = \hbar\omega / k_B T$ y $x_D = \hbar\omega_D / k_B T = \theta/T$. Esto define la llamada **temperatura de Debye (θ)** dada por:

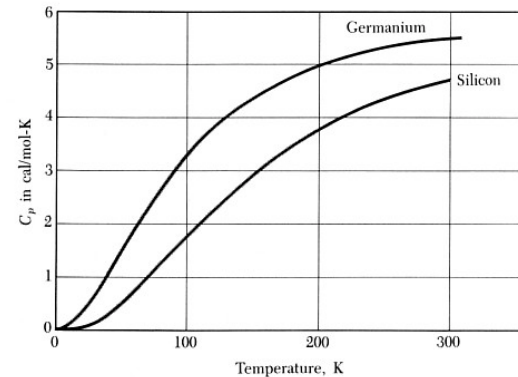
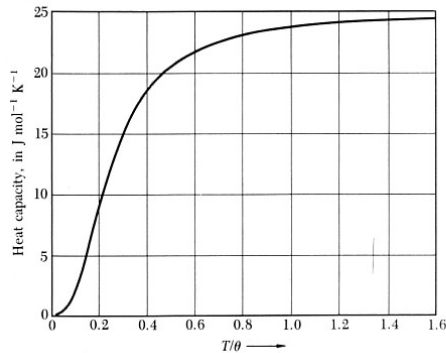
$$\theta = \frac{\hbar v}{k_B} \left(\frac{6\pi^2 N}{V} \right)^{1/3}$$

Utilizando esta definición:

$$U = 9Nk_B T \left(\frac{T}{\theta} \right)^3 \int_0^{x_D} dx \frac{x^3}{e^x - 1}$$

El calor específico queda:

$$C_V = \frac{3V\hbar^2}{2\pi^2 v^3 k_B T^2} \int_0^{\omega_D} d\omega \frac{\omega^4 e^{\hbar\omega/k_B T}}{(e^{\hbar\omega/k_B T} - 1)^2} = 9Nk_B \left(\frac{T}{\theta}\right)^3 \int_0^{\theta/T} dx \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2}$$



Límite de temperatura alta ($\theta/T \ll 1$) : $e^x \approx 1$ ($e^x - 1$)² $\approx x^2$.

$$C_V = 9Nk_B \left(\frac{T}{\theta}\right)^3 \int_0^{\theta/T} x^2 dx = 3Nk_B \quad \text{Ley de Dulong- Petit.}$$

Modelo de Einstein:

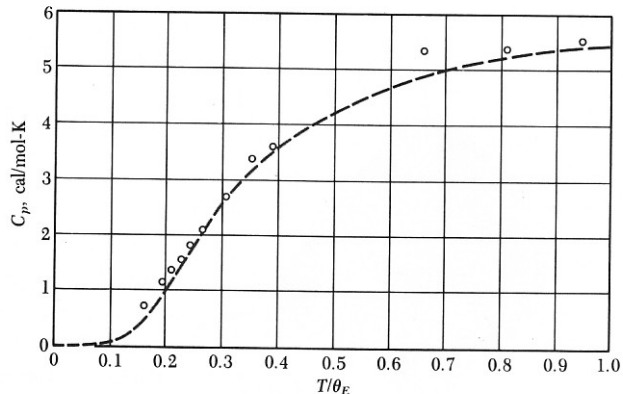
- 1.- La frecuencia es independiente de K , $\omega = \omega_0$, (aproximación para las ramas ópticas).
- 2.- Tenemos también N modos \times 3 polarizaciones $3N$ estados.

Consecuencia de 1 y 2 es $D(\omega) = 3N \delta(\omega - \omega_0)$. Definimos $\hbar\omega_0 / k_B T = \theta_E / T$

$$U = \frac{3N\hbar\omega_0}{e^{\hbar\omega_0/k_B T} - 1} \text{ y la capacidad calorífica queda}$$

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = 3Nk_B \left(\frac{\hbar\omega_0}{k_B T} \right)^2 \frac{e^{\hbar\omega_0/k_B T}}{(e^{\hbar\omega_0/k_B T} - 1)^2}$$

Diamante $\theta_E = 1320\text{K}$



Para $T/\theta_E \gg 1$ $C_V = 3N k_B$.

Para $T/\theta_E \ll 1$ $C_V \propto \exp(-\theta_E/T)$