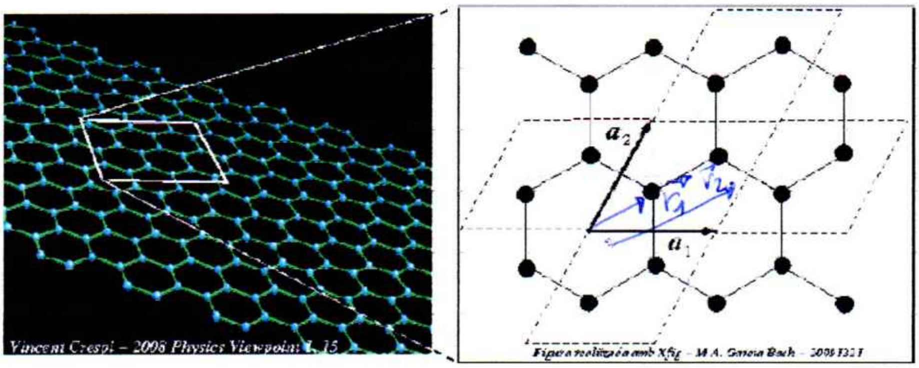
RESOLUCIÓ DEL PROBLEMA B2

El grafè és una estructura cristal·lina bidimensional formada per àtoms de carboni disposats en una xarxa hexagonal amb una base de dos àtoms idèntics situats a $\vec{\mathbf{r}}_1 = (\vec{\mathbf{a}}_1 + \vec{\mathbf{a}}_2)/3$ i $\vec{\mathbf{r}}_2 = 2(\vec{\mathbf{a}}_1 + \vec{\mathbf{a}}_2)/3$, respectivament, on $\vec{\mathbf{a}}_1 = a\hat{\mathbf{x}}$ i $\vec{\mathbf{a}}_2 = (a/2)(\hat{\mathbf{x}} + \sqrt{3}\hat{\mathbf{y}})$ (vegeu la figura adjunta). *(10 punts)*



Les vibracions perpendiculars al pla del grafè es poden descriure considerant interaccions harmòniques només a primers veïns, amb una constant de força *C*. Si ens limiten a aquestes vibracions:

a) Quantes branques i de quina natura (acústiques o òptiques) es trobaran en la relació de dispersió? *(1 punt)*

Si només considerem vibracions perpendiculars al pla, encara que el cristall sigui bidimensional, l'oscil·lació és unidimensional.

D'altra banda, encara que els dos àtoms de la base siguin idèntics, es troben en entorns atòmics diferents, de manera que oscil·len amb amplituds diferents.

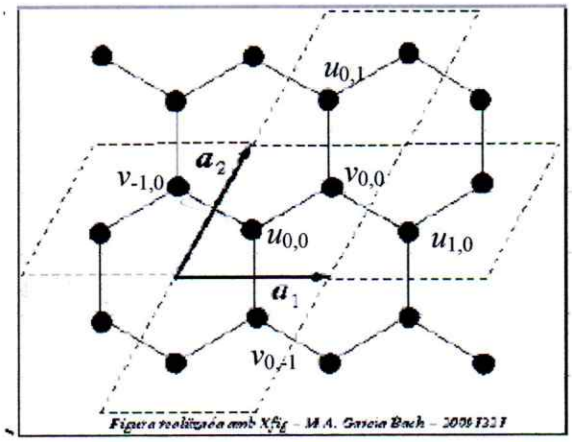
Per tant, si fem el recompte de branques com *Dp*, on *D* és la dimensionalitat de la vibració, és a dir, *D* = 1, i *p* és el nombre d'àtoms a la base amb oscil·lacions diferents, és a dir, *p* = 2, tindrem 2 branques, de les quals, com de costum, una és acústica (associada a la dimensionalitat de la vibració) i l'altra és òptica (associada a la presència dels dos àtoms que oscil·len de manera diferent).

nombre àtoms

b) Quines seran les equacions de moviment dels àtoms? *(3 punts)*

Per escriure aquestes equacions hem d'etiquetar el desplaçament de cada àtom respecte a la seva posició d'equilibri dins de la cel·la primitiva corresponent mitjançant dos subíndexs, un per a cada direcció donada per cada vector primitiu.

Així, podem etiquetar la cel·la primitiva central de l'esquema adjunt com (0,0), i les cel·les veïnes com (1,0), (–1,0), (0,1) i (0,–1), segons ens desplacem respecte a la cel·la (0,0) al llarg de $\vec{\mathbf{a}}_1$, en positiu o negatiu, o al llarg de $\vec{\mathbf{a}}_2$, en positiu o negatiu, respectivament.



En el marc d'aquest esquema, si considerem que el desplaçament d'un dels àtoms és $u_{n,m}$ i el desplaçament de l'altre és $v_{n,m}$, i que cadascun dels àtoms que es desplaça segons $u_{n,m}$ està acoblat a tres àtoms que es desplacen segons $v_{n,m}$, i a l'inrevés, les equacions de moviment seran les següents:

$$m\,\ddot{u}_{0,0} = C(v_{0,0} + v_{-1,0} + v_{0,-1} - 3u_{0,0})$$

$$m\,\ddot{v}_{0,0} = C(u_{0,0} + u_{1,0} + u_{0,1} - 3v_{0,0})$$

Kn a
K(n+1) a

Escrivim ara les expressions dels desplaçaments com segueix:

$$u_{n,m} = u_0'\exp\left[i\left(\vec{\mathbf{k}}\cdot(\vec{\mathbf{R}}_{n,m} + \vec{\mathbf{r}}_1) - \omega t\right)\right] = u_0 \exp\left[i\left(\vec{\mathbf{k}}\cdot\vec{\mathbf{R}}_{n,m} - \omega t\right)\right],$$

$$v_{n,m} = v_0'\exp\left[i\left(\vec{\mathbf{k}}\cdot(\vec{\mathbf{R}}_{n,m} + \vec{\mathbf{r}}_2) - \omega t\right)\right] = v_0 \exp\left[i\left(\vec{\mathbf{k}}\cdot\vec{\mathbf{R}}_{n,m} - \omega t\right)\right],$$

on $\vec{\mathbf{k}}$ és el vector d'ona de l'oscil·lació, $\vec{\mathbf{R}}_{n,m}$ és el vector de la xarxa de Bravais que dóna la posició de la cel·la (n, m) respecte a un cert origen, ω és la freqüència d'oscil·lació i, a més, hem tingut en compte que els factors associats als vectors de la base atòmica, $\vec{\mathbf{r}}_1$ i $\vec{\mathbf{r}}_2$, són els mateixos independentment de la cel·la primitiva que es consideri i, per tant, els podem incorporar a les amplituds d'oscil·lació.

Derivant aquestes expressions, i considerant que els vectors de la xarxa de Bravais per a les cel·les que hem considerat vénen donats per

$$\begin{aligned} \vec{\mathbf{R}}_{0,0} &= \vec{\mathbf{0}} \\ \vec{\mathbf{R}}_{1,0} &= \vec{\mathbf{a}}_1 = -\vec{\mathbf{R}}_{-1,0} \\ \vec{\mathbf{R}}_{0,1} &= \vec{\mathbf{a}}_2 = -\vec{\mathbf{R}}_{0,-1} \end{aligned}$$

podem escriure les equacions de moviment com

$$\begin{cases} -m\,\omega^2 u_0 = C\left(v_0 + v_0 e^{-i\vec{\mathbf{k}}\cdot\vec{\mathbf{a}}_1} + v_0 e^{-i\vec{\mathbf{k}}\cdot\vec{\mathbf{a}}_2} - 3u_0\right) \\ -m\,\omega^2 v_0 = C\left(u_0 + u_0 e^{i\vec{\mathbf{k}}\cdot\vec{\mathbf{a}}_1} + u_0 e^{i\vec{\mathbf{k}}\cdot\vec{\mathbf{a}}_2} - 3v_0\right) \end{cases}$$

I si agrupem sumands, les equacions queden com segueix:

$$\begin{cases} \left(m\,\omega^2 - 3C\right)u_0 + \left(1 + e^{-i\vec{\mathbf{k}}\cdot\vec{\mathbf{a}}_1} + e^{-i\vec{\mathbf{k}}\cdot\vec{\mathbf{a}}_2}\right)C v_0 = 0 \\ \left(1 + e^{i\vec{\mathbf{k}}\cdot\vec{\mathbf{a}}_1} + e^{i\vec{\mathbf{k}}\cdot\vec{\mathbf{a}}_2}\right)C u_0 + \left(m\,\omega^2 - 3C\right)v_0 = 0 \end{cases}$$

c) Determineu l'expressió formal de les relacions de dispersió, $\omega(\vec{\mathbf{k}})$, per a les diferents branques. *(3 punts)*

El sistema homogeni format per les equacions de moviment té solució no trivial si i només si el seu determinant s'anul·la.

Per tant, imposem

$$\begin{vmatrix} \left(m\,\omega^2 - 3C\right) & \left(1 + e^{-i\vec{\mathbf{k}}\cdot\vec{\mathbf{a}}_1} + e^{-i\vec{\mathbf{k}}\cdot\vec{\mathbf{a}}_2}\right)C \\ \left(1 + e^{i\vec{\mathbf{k}}\cdot\vec{\mathbf{a}}_1} + e^{i\vec{\mathbf{k}}\cdot\vec{\mathbf{a}}_2}\right)C & \left(m\,\omega^2 - 3C\right) \end{vmatrix} = 0$$

Desenvolupant el determinant, tenim

$$\left(m\,\omega^2 - 3C\right)^2 - \left(1 + e^{-i\vec{\mathbf{k}}\cdot\vec{\mathbf{a}}_1} + e^{-i\vec{\mathbf{k}}\cdot\vec{\mathbf{a}}_2}\right)\left(1 + e^{i\vec{\mathbf{k}}\cdot\vec{\mathbf{a}}_1} + e^{i\vec{\mathbf{k}}\cdot\vec{\mathbf{a}}_2}\right)C^2 = 0$$

$$m^2\,\omega^4 - 6mC\omega^2 + 9C^2 - \left(3 + e^{i\vec{\mathbf{k}}\cdot\vec{\mathbf{a}}_1} + e^{-i\vec{\mathbf{k}}\cdot\vec{\mathbf{a}}_1} + e^{i\vec{\mathbf{k}}\cdot\vec{\mathbf{a}}_2} + e^{-i\vec{\mathbf{k}}\cdot\vec{\mathbf{a}}_2} + e^{i\vec{\mathbf{k}}\cdot(\vec{\mathbf{a}}_1 - \vec{\mathbf{a}}_2)} + e^{-i\vec{\mathbf{k}}\cdot(\vec{\mathbf{a}}_1 - \vec{\mathbf{a}}_2)}\right)C^2 = 0$$

$$m^2\,\omega^4 - 6mC\omega^2 + 6C^2 - 2\left[\cos\left(\vec{\mathbf{k}}\cdot\vec{\mathbf{a}}_1\right) + \cos\left(\vec{\mathbf{k}}\cdot\vec{\mathbf{a}}_2\right) + \cos\left(\vec{\mathbf{k}}\cdot\left(\vec{\mathbf{a}}_1 - \vec{\mathbf{a}}_2\right)\right)\right]C^2 = 0$$

Substituïm ara els valors dels productes $\vec{\mathbf{k}}\cdot\vec{\mathbf{a}}_1 = k_x a$ i $\vec{\mathbf{k}}\cdot\vec{\mathbf{a}}_2 = \frac{a}{2}(k_x+\sqrt{3}k_y)$:

$$m^2\omega^4 - 6mC\omega^2 + 6C^2 - 2\left[\cos(k_x a) + \cos\left((k_x+\sqrt{3}k_y)\tfrac{a}{2}\right) + \cos\left((k_x-\sqrt{3}k_y)\tfrac{a}{2}\right)\right]C^2 = 0$$

$$m^2\omega^4 - 6mC\omega^2 + 6C^2 - 2\left[\cos(k_x a) + \cos\left((k_x+\sqrt{3}k_y)\tfrac{a}{2}\right) + \cos\left((k_x-\sqrt{3}k_y)\tfrac{a}{2}\right)\right]C^2 = 0$$

$$\omega^4 - \frac{6C}{m}\omega^2 + 2\left(\frac{C}{m}\right)^2\left[3-\cos k_x a - 2\cos\frac{k_x a}{2}\cos\frac{\sqrt{3}k_y a}{2}\right]C^2 = 0$$

Resolent l'equació en ω^2, obtenim

$$\omega_\pm^2 = \frac{3C}{m}\left\{1\pm\left[1-\frac{2}{9}\left(3-\cos k_x a - 2\cos\frac{k_x a}{2}\cos\frac{\sqrt{3}k_y a}{2}\right)\right]^{1/2}\right\}$$

Finalment, trobem les relacions de dispersió per a la branca acústica (ω_-) i per a la branca òptica (ω_+) quedant-nos només amb el signe positiu quan traiem l'arrel quadrada:

$$\omega_\pm = \sqrt{\frac{3C}{m}}\left\{1\pm\left[1-\frac{2}{9}\left(3-\cos k_x a - 2\cos\frac{k_x a}{2}\cos\frac{\sqrt{3}k_y a}{2}\right)\right]^{1/2}\right\}^{1/2}$$

d) Trobeu el límit de la relació de dispersió corresponent a la branca acústica per a longituds d'ona llargues. *(1.5 punts)*

El límit de longituds d'ona llargues correspon a vectors d'ona propers a zero.

En aquest límit, podem aproximar el cosinus pels dos primers termes del seu desenvolupament de Taylor i quedar-nos a segon ordre d'aproximació quan operem:

$$\cos k_x a + 2\cos\frac{k_x a}{2}\cos\frac{\sqrt{3}k_y a}{2} \approx 1-\frac{1}{2}(k_x a)^2 + 2\left[1-\frac{1}{2}\left(\frac{k_x a}{2}\right)^2\right]\left[1-\frac{1}{2}\left(\frac{\sqrt{3}k_y a}{2}\right)^2\right] \approx$$

$$\approx 1-\frac{k_x^2 a^2}{2} + 2\left[1-\frac{k_x^2 a^2}{8}-\frac{3k_y^2 a^2}{8}\right] = 3-\frac{3}{4}\left(k_x^2+k_y^2\right)a^2 = 3\left(1-\frac{k^2 a^2}{4}\right)$$

Substituint això a la relació de dispersió per a la branca acústica obtenim

$$\omega_-^2 \approx \frac{3C}{m}\left\{1-\left[1-\frac{2}{9}\frac{3}{4}k^2a^2\right]^{1/2}\right\} = \frac{3C}{m}\left\{1-\left[1-\frac{k^2a^2}{6}\right]^{1/2}\right\}$$

Finalment, podem aproximar l'arrel quadrada pels dos primers termes del seu desenvolupament de Taylor:

$$\omega_-^2 \approx \frac{3C}{m}\left\{1-\left[1-\frac{k^2a^2}{6}\right]^{1/2}\right\} \approx \frac{3C}{m}\left\{1-\left[1-\frac{k^2a^2}{12}\right]\right\} = \frac{C}{4m}k^2a^2$$

Per tant, l'expressió de la branca acústica en aquest límit és

$$\omega_- \approx \sqrt{\frac{C}{m}}\frac{ka}{2}$$

e) Quina serà la velocitat de propagació de les ones elàstiques en aquest límit? *(1.5 punts)*

La velocitat de propagació ve donada per l'expressió

$$v_g = \vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{k}}}\omega(\vec{\mathbf{k}})$$

En el cas que ens ocupa, es tracta de la velocitat del so, que serà un vector amb dues components, cadascuna de les quals és

$$v_{so,i} = \frac{\partial \omega_-}{\partial k_i} = \sqrt{\frac{C}{m}}\frac{a}{2}\frac{k_i}{k}$$

Per tant, el vector serà

$$\vec{\mathbf{v}}_{so} = \sqrt{\frac{C}{m}}\frac{a}{2k}(k_x\hat{\mathbf{x}} + k_y\hat{\mathbf{y}})$$

I el mòdul d'aquest vector serà

$$v_{so} = \sqrt{\frac{C}{m}}\frac{a}{2}$$