4.2. Sigui un cristall bidimensional, amb xarxa quadrada de constant a i base de dos àtoms, de masses m i M i situats a $(0,0)$ i a $(1/2,1/2)$. Per a les vibracions perpendiculars al pla, els àtoms només interaccionen a primers veïns, de forma harmònica, amb constant d'interacció C.

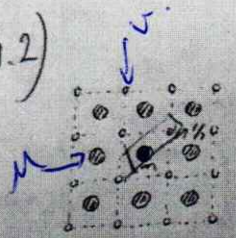
a) Escriviu les equacions del moviment i doneu-ne la matriu dinàmica.

b) Obtingueu l'expressió formal per a les relacions de dispersió, $\omega(\vec{q})$.

c) Doneu els valors de $\omega(\vec{q})$ en el centre, Γ, el centre de l'aresta, X, i en un vèrtex, M, de la primera zona de Brillouin.

d) Feu un esquema de $\omega(\vec{q})$ al llarg del camí $\Gamma X M$.

4.2)



Etiquetem les cel·les.

(-1,1)	(0,1)	(1,1)
(-1,0)	(0,0)	(1,0)
(-1,-1)	(0,-1)	(1,-1)

Cel·les → (nm)

àtoms, $i = 1,2$

$(-1) \equiv \bar{1}$

$$m\ddot{u}_{(0,0)} = C\left(v_{(00)} + v_{(\bar{1}0)} + v_{(\bar{1}\bar{1})} + v_{(0\bar{1})} - 4u_{(00)}\right)$$
$$M\ddot{v}_{(00)} = C\left(u_{(11)} + u_{(01)} + u_{(00)} + u_{(10)} - 4v_{(00)}\right)$$

Tots els àtoms vibren amb la mateixa ω. I compleixen la cond. de Bloch. →

$$u = S_1 \to u_{(mn)} = u\, e^{i(q_x m a + q_y n a - \omega t)}$$
$$v = S_2 \to v_{(mn)} = u_{(mn)} \cdot \frac{v}{u}$$

Em queda:

$$-m\omega^2 u = C\left(v + v e^{-iq_x a} + v e^{-i(q_x+q_y)a} + v e^{-iq_y a} - 4u\right)$$
$$-M\omega^2 v = C\left(u e^{i(q_x+q_y)a} + u e^{iq_y a} + u + e^{iq_x a} - 4v\right)$$
$\Rightarrow (*)$

$$\boxed{A = e^{i(q_x+q_y)a/2} \cos\frac{q_x a}{2} \cos\frac{q_y a}{2}}$$

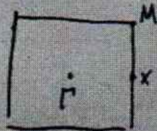
$$(*)\quad \begin{cases} -m\omega^2 u = 4C[vA^* - u] \\ -M\omega^2 v = 4C[uA - v] \end{cases} \to \text{Sol.: } 0 = \begin{vmatrix} 4C - m\omega^2 & 4CA^* \\ 4CA & 4C - M\omega^2 \end{vmatrix} = \cancel{mM\omega^4 \; 4C(m+M)\omega^2}$$

$$= mM\omega^4 - 4C(m+M)\omega^2 + (4C)^2\left[1 - |A|^2\right] = 0 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \omega^2 = \frac{1}{2}\left\{4C\left(\frac{1}{M} + \frac{1}{m}\right) \pm \sqrt{(4C)^2\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right)^2 - 4\cdot\frac{(4C)^2}{mM}(1 - |A|^2)}\right\} = 2C\left[\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \pm \sqrt{\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right)^2 + \ldots}\right.$$

$\frac{4|A|^2}{mM}$

c)



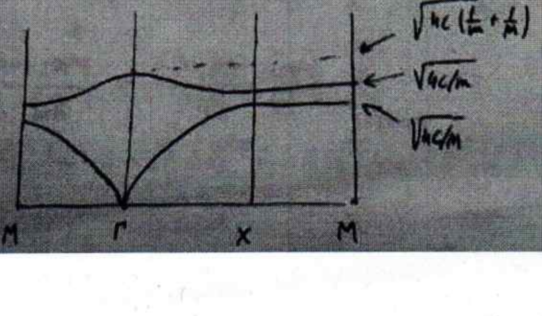
A Γ: $q_x = q_y = 0 \Rightarrow |A| = 1$ $\quad 1 - |A|^2 = 0$

$$\omega = \sqrt{2C}\left\{\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \pm \sqrt{\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right)^2 + \cancel{\frac{X}{mM}}}\right\}^{1/2} = \sqrt{2C}\left\{\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \pm \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right)\right\}^{1/2} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \omega_+(\Gamma) = \sqrt{4C\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right)} \\ \omega_-(\Gamma) = 0 \quad \text{(acústica)} \end{cases}$$

X): $q_x = \frac{\pi}{a},\ q_y = 0 \to |A| = 0 \Rightarrow \omega_\pm = \sqrt{2C}\left\{\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \pm \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right)\right\}^{1/2} \Rightarrow \begin{cases} \omega_+(X) = \sqrt{\frac{4C}{m}} \\ \omega_-(X) = \sqrt{\frac{4C}{M}} \end{cases}$

M): $q_x = \frac{\pi}{a},\ q_y = \frac{\pi}{a}$, $|A| = 0 \to$



$2\cos qa - 2 = 2(\cos qa - 1)$
$= -4\sin^2 qa/2$