

Treball de Fi de Grau en Física

Fonons i espectroscòpia Ramman en semiconductors bidimensionals

AGOST de 2021

Alumne/a: Casimiro Victoria Castillo

Tutor/a (1): Alberto García Cristóbal

Tutor/a (2): Alejandro Molina Sanchez

Resum / Abstract

Els materials bidimensionals (2D) com el grafè són de gran interès tant per les seues propietats físiques exclusives com per les seues aplicacions potencials. L'estudi de la dinàmica de la xarxa cristal·lina (*fonons*) d'estos materials és un requisit previ per entendre la seua estabilitat estructural i propietats tèrmiques, així com les seues propietats de transport i òptiques.

Este Treball de Fi de Grau consisteix en la computació dels modes vibracionals de materials semiconductors 2D y la seua correlació amb els observables rellevants per a la interpretació dels experiments de dispersió de la llum.

Abstract. . . The long-range character of the dynamical matrix limits the validity of force-constant approaches that take only interaction with few neighboring atoms into account. However, by fitting the force-constants to the ab initio dispersion relation, we show that the popular 4th-nearest-neighbor force-constant approach yields an excellent fit for the low frequency modes and a moderately good fit (with a maximum deviation of 6%) for the high-frequency modes [4]

1 Introducció

En este treball s'empra el mètode de constants de força (*FCM* per les seues sigles en anglés, force constant method), per descriure la dinàmica reticular de un material bidimensional, el nitrur de bor monocapa, *BN*.

En este model la dinàmica dels àtoms es descriu per un conjunt de simples constants de força de molls que connecten cada àtom amb els del seu entorn, fins a un nombre determinat de veïns. Altres mètodes com els càlculs realitzats a partir de primers principis (*ab initio*) emprant la teoria del funcional densitat (DFT, per les seues sigles en anglés density-functional density) o el mètode de camp de força de valència (*VFF*, valence force field) necessiten temps de càlcul molt més llargs. El mètode de constants de força empra un conjunt reduït de paràmetres que poden ajustar-se a les mesures experimentals o bé, com s'ha fet en este treball, a la relació de dispersió calculada per primers principis. I encara que estem tractant amb un mètode senzill, este ha demostrat que pot proporcionar resultats fiables [4].

1.1 Xarxa cristal·lina

Abans d'explicar el mètode emprat en este treball repassem alguns conceptes i aclarim la notació emprada.

Sabem que els àtoms que constitueixen un sòlid cristal·lí estan distribuïts de una manera regular en l'espai, y per descriure esta distribució regular s'empra el concepte matemàtic de *xarxa cristal·lina*, introduït per A. Bravais en 1845: una xarxa cristal·lina es defineix com una distribució discreta i regular de punts que té sempre la mateixa aparença independentment de quin punt escollim com origen de coordenades.

En el cas que anem a tractar, un cristall bidimensional, la xarxa cristal·lina bidimensional pot generar-se a partir de dos vectors base, de manera que els vectors de posició dels *nucs de la xarxa*, els vectors de translació cristal·lina, tenen la forma:

$$\mathbf{R}_1 = \mathbf{R}_{l_1 l_2} = l_1 \mathbf{a}_1 + l_2 \mathbf{a}_2 \quad (1)$$

on l es denomina índex del nuc.

Els cristalls o *estructures cristallines* són distribucions regulars d'àtoms en l'espai de posicions i els podem descriure associant a cadascun dels nucs d'una xarxa cristallina en l'espai de posicions un conjunt d'àtoms o base (*producte de convolució de la base y la xarxa de nucs*). En el cas del BN tractem amb una base diatòmica.

1.1.1 Xarxa recíproca. Primera zona de Brillouin.

Donat un conjunt de vectors base primitius, p_i , de la xarxa cristallina en l'espai de posicions, la condició:

$$\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{p}_j^* = \delta_{ij} \quad (2)$$

on δ_{ij} és la delta de Kronecker, defineix un altre conjunt de vector p_j^* , coneguts com vectors primitius recíprocs, i què son els vectors primitius que defineixen una altra xarxa coneguda com *xarxa recíproca*. Els vectors recíprocs, i els vectors de translació cristal·lina recíprocs, tenen dimensions de inversa de longitud i es representen en l'*espai recíproc* o de números d'ona. **Les xarxes cristal·lines real y recíproca són dues descripcions equivalents del mateix sistema físic: el sòlid cristal·lí** que s'està estudiant.

L'espai 2π -recíproc és el fonamental en l'estudi dels sòlids cristal·lins, ja que els estats de les partícules i les interaccions físiques de interès es descriuen en l'espai de vectors d'ona, \mathbf{k} .

Podem interpretar que

$$\mathbf{K}_{h_1 h_2} = 2\pi (h_1 \mathbf{a}_1^* + h_2 \mathbf{a}_2^*) \quad (3)$$

són els vectors de translació cristal·lina que defineixen una xarxa cristal·lina en aquest espai 2π -recíproc (són es diferencia de l'espai recíproc en un factor d'escala 2π). En termes físics, l'espai 2π -recíproc és l'*espai de vectors d'ona* \mathbf{k} , i a falta d'un factors d'escala \hbar , coincideix amb l'espai de moments $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$.

Cel·les de Wigner-Seitz (WS) y primera zona de Brillouin (ZB) Per descriure la xarxa 2π -recíproca, emprarem el criteri de *Wigner-Seitz*. Las *cel·les de Wigner-Seitz* estan centrades en un nuc de la xarxa i es defineixen com la regió més pròxima a un nuc (el del centre de la cel·la) que a qualsevol altre. Per determinar la seua forma, partim d'un nuc qualsevol com a origen, construïm els segments que uneixen este nuc amb els seus veïns i es tracen els plans que bisecten cadascun d'estos segments: la cel·la de WS és la cel·la de menor volum al voltant de l'origen que està delimitada per estos plans (rectes en el caso d'una xarxa bidimensional).

Notem que en l'espai de \mathbf{k} emprarem cel·les unitat de WS mentre que en l'espai de posicions sempre emprarem cel·les unitat de Bravais. La cel·la de WS de la xarxa 2π -recíproca es coneix com **primera zona de Brillouin (ZB)**

1.2 Vibracions atòmiques en cristalls

1.2.1 Model de BORN i VON KARMAN

Els àtoms constituents de un sòlid cristal·lí no estan immòbils sino que vibren al voltant de la seua posició de equilibri.

En 1912, Born y Von Karman [3] introduïren un model realístic per de la dinàmica cristal·lina, on la idea fonamental es que cada mode normal té l'energia de un oscil·lador de Planck. La dinàmica del sistema es descriu de manera sencilla, no en termes de les vibracions de àtoms individuals, sino en termes de moviments col·lectius en forma de ones viatgeres anomenades vibracions cristal·lines (lattice vibrations) per Born. Cada vibració cristal·lina es caracteritza per una freqüència y un vector de ona. La vibració cristal·lina quantitzada, o mode normal, s'anomena fonó per analogia amb el fotó.

1.2.2 Aproximació adiabàtica

Moltes propietats físiques dels sòlids poden classificar-se bé com electròniques o bé com vibracionals segons estiguen determinades pels electrons (de valència) o per les vibracions dels àtoms (nuclis iònics): normalment considerem els nuclis i els electrons com a constituent independents del sòlid, ja que les masses dels electrons i dels nuclis són tan diferents que el moviment dels nuclis és molt més lent que el dels electrons. L'*aproximació adiabàtica*, introduïda per Born i Oppenheimer [2] estableix que els electrons responen de manera pràcticament instantània als desplaçaments atòmics, de manera que el seu estat ve determinat per les posicions atòmiques instantànies, mentre que els àtoms no poden respondre a les ràpides variacions espacials dels electrons: diguem que els electrons segueixen el moviment iònic adiabàticament.

Notem però que estem tractant amb una primera aproximació al problema y algunes propietats físiques venen determinades per la interacció entre els electrons y les vibracions atòmiques.

1.2.3 Aproximació harmònica

Les vibracions reticulars estan regides per les forces que experimenten els àtoms quan es desplacen de la seua posició d'equilibri. La primera hipòtesi és que cada àtom té una posició d'equilibri en el cristall, que denotem per $\mathbf{r}_{\mathbf{l},\alpha}^{(0)} = \mathbf{R}_{\mathbf{l}} + \mathbf{d}_{\alpha}$ y considerarem que estos àtoms vibren al voltant d'esta posició d'equilibri, $\mathbf{r}_{\mathbf{l},\alpha} = \mathbf{r}_{\mathbf{l},\alpha}^{(0)} + \mathbf{u}_{\mathbf{l},\alpha}(t)$, amb una amplitud menuda (en comparació amb la distància interatòmica) al voltant d'aquesta, de manera que el sòlid es troba en estats que corresponen al que macroscòpicament es coneix com *la regió de comportament elàstic lineal*, on es verifica la llei de Hooke.

Podem per tant aproximar l'energia potencial de interacció pel terme harmònic del seu desenvolupament en sèrie de potències del desplaçament:

Les equacions de moviment en l'aproximació harmònica s'escriuen en la coneguda forma:

$$M_{\alpha} \ddot{\mathbf{u}}_{\mathbf{l},\alpha}(t) = - \sum_{\mathbf{l}',\alpha'} \Phi_{\alpha,\alpha'}(\mathbf{R}_{\mathbf{l}} - \mathbf{R}_{\mathbf{l}}') \cdot \mathbf{u}_{\mathbf{l}',\alpha'}(t) \quad (4)$$

Aquesta equació representa un sistema d'oscil·ladors harmònics acoblats, on α i α' fan referència al àtoms de la base considerats, l'índex vectorial \mathbf{l} (que sol aparèixer en la literatura com n) indica el nuc considerat i $\mathbf{R}_{\mathbf{l}}$ és el vector de translació cristal·lina.

⋮

1.2.4 Matriu dinàmica

La matriu dinàmica és la magnitud central de la dinàmica reticular: les freqüències dels fonons es calculen a partir dels valors propis de la matriu dinàmica:

$$\sum_{\alpha'} D_{\alpha\alpha'}(\mathbf{q}) \cdot \mathbf{e}_{\alpha'}(\mathbf{q}) = \omega^2 \mathbf{e}_{\alpha}(\mathbf{q}) \quad (5)$$

Per tant, les freqüències ω com funció del vector d'ones \mathbf{q} del fonó són solució de l'equació secular:

$$\det \left| \frac{1}{\sqrt{M_{\alpha} M_{\alpha'}}} D_{\alpha\alpha'}^{ij}(\mathbf{q}) - \omega^2(\mathbf{q}) \right| = 0 \quad (6)$$

on M_{α} es la massa de l'àtom α y la matriu dinàmica ve definida por:

$$D_{\alpha,\alpha'}^{i,j} = \frac{\partial^2 E}{\partial u_{\alpha}^{*i}(\mathbf{q}) \partial u_{\alpha'}^j(\mathbf{q})} \quad (7)$$

on u_{α}^i representa el desplaçament de l'àtom α en la direcció i .

La segona derivada de l'energia de l'equació 7 correspon al canvi en la força que actua sobre l'àtom α' en la direcció j quan es desplaça l'àtom α en la direcció i

$$D_{\alpha\alpha'}^{ij}(\mathbf{q}) = \frac{\partial}{\partial u_i^{*\alpha}} F_{\alpha'}^j(\mathbf{q}) \quad (8)$$

⋮

Passem ara a descriure el sistema que volem estudiar

2 Descripció del cristall de BN

Donat que el càlcul dels modes de vibració comença per establir la geometria del cristall en equilibri, comprovem amb les dades proporcionades que el *BN* monocapa es tracta d'un cristall bidimensional hexagonal de base diatòmica, la cel·la unitat del qual ve donada per (dades proporcionades):

$$\mathbf{a}_1 = (a, 0) \quad \mathbf{a}_2 = \left(-\frac{1}{2}a, \frac{1}{2}\sqrt{3}a\right) \quad (9)$$

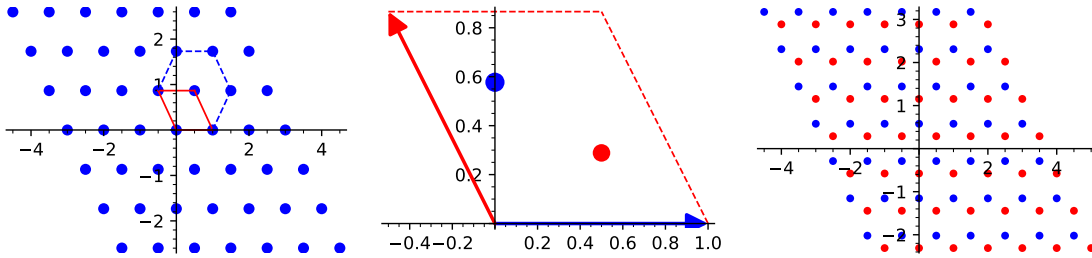
Podem comprovar que efectivament es tracta de una cel·la hexagonal, ja que els seus vectors primitius formen un angle de $\frac{2}{3}\pi$ rad.

Les posicions atòmiques d'equilibri en la cel·la unitat són:

$$\mathbf{d}_B = \frac{1}{3}\mathbf{a}_1 + 2\mathbf{a}_2 \quad \mathbf{d}_N = \frac{2}{3}\mathbf{a}_1 + \frac{1}{3}\mathbf{a}_2 \quad (10)$$

Tal com s'indica en la introducció teòrica, enumere les cel·les amb un índex vectorial $\mathbf{l} = (l_1, l_2)$, on l_1 i l_2 són dos nombres enters.

Les posicions del nus de la xarxa són $\mathbf{R}_\mathbf{l} = l_1\mathbf{a}_1 + l_2\mathbf{a}_2$.



(a) Xarxa de nus

(b) Cel·la unitat

(c) Cristall

Per construir la matriu dinàmica necessitem com a pas previ classificar els àtoms del cristall segons la seua distància als àtoms de la cel·la unitat, ja que els classificarem com primers, segons, tercers ... veïns segons aquesta distància i els assignarem un tensor de constants de forces que dependrà de a quina família de veïns pertanyen.

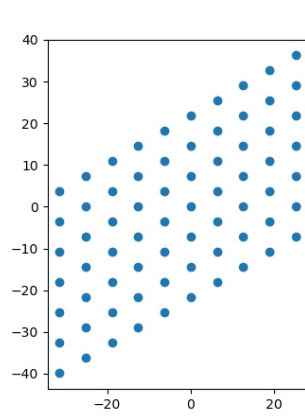
2.1 Primera zona de Brillouin

Passe ara a mostrar la xarxa 2π -recíproca associada a la xarxa de nus del cristall de *BN*, la primera zona de Brillouin y calcular els punts de màxima simetria de la primera zona de Brillouin:

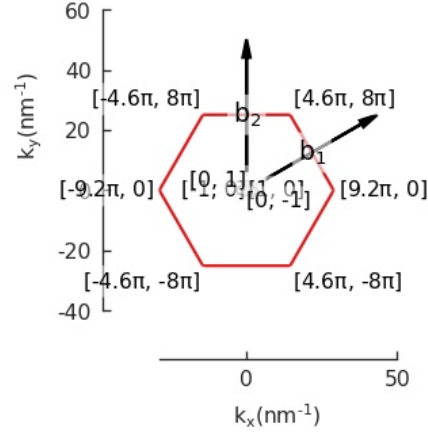
Els vectors primitius de la xarxa 2π -recíproca són:

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \left(\hat{k}_x + \frac{1}{\sqrt{3}}\hat{k}_y \right) \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a} \left(\frac{2}{\sqrt{3}}\hat{k}_y \right) \quad (11)$$

i la xarxa 2π -recíproca és:



(a) Xarxa en l'espai 2π -recíproc



(b) Primera zona de Brillouin

2.2 Tensor de constants de força i matriu dinàmica

Una vegada descrit el nostre sistema físic anem a obtindre la matriu dinàmica d'aquest, ja que com hem vist els seus valors propis, ω^2 , ens donen la freqüència de propagació de cadascun dels modes.

Obtesses les posicions dels àtoms y classificats estos com primers, segons, etc. veïns, segons la distància al respectiu àtom de la cel·la $\mathbf{0}$, procedim a calcular la contribució a la matriu dinàmica de cadascun dels àtoms, per la qual cosa necessitem conèixer el tensor de constants de força que correspon a la interacció de cada àtom amb el seu n -èssim veí.

La forma general del tensor de forces d'un n -èssim veí és de la forma [4]:

$$C_n = \begin{pmatrix} \phi_n^r & \xi_n & 0 \\ -\xi_n & \phi_n^{ti} & 0 \\ 0 & 0 & \phi_n^{to} \end{pmatrix} \quad (12)$$

on el sistema de coordenades se elegeix de manera que x és la coordenada longitudinal (en la línia que conecta els dos àtoms), r ; y la coordenada transversal en el planol, ti , i z la coordenada perpendicular al planol to . L'estructura diagonal a blocs de la matriu reflexa el fet que las vibracions interplanars y les de fora de , to , (en la direcció z) estan completament desacoblades.

Anem a suposar (per simplificar) que un desplaçament longitudinal (radial, que estarà contés en el planol del cristall) o transversal (tangencial, siga en el planol o perpendicular al planol) sols genera una força radial o transversal, es a dir, $\xi_n = 0$ tal y com es realitza [1]. Esta aproximació es coneix com la aproximación $4NNFC$,

Por tant, com primera aproximació anem a considerar que el tensor de constants de força d'un àtom classificat com n -èssim veí, situat en la direcció \hat{x} respecte del àtom de la cel·la $\mathbf{0}$, té la forma diagonal:

$$C_n(0) = \begin{pmatrix} \phi_n^r & 0 & 0 \\ 0 & \phi_n^{ti} & 0 \\ 0 & 0 & \phi_n^{to} \end{pmatrix} \quad (13)$$

i per tant el tensor de constants de força de cadascun dels n -èssims veïns reals l'obtenim rotant la matriu de l'equació 13:

$$C_n(\theta) = U^{-1}(\theta)C_n(0)U(\theta) \quad (14)$$

on $\mathbf{U}(\theta)$ ve donada per:

$$\mathbf{U}(\theta) = \begin{pmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta) & 0 \\ -\sin(\theta) & \cos(\theta) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (15)$$

Un punt important és que quan considerem la interacció entre àtoms del mateix tipus (en el cas del BN és fàcil discriminarlos, ja que són àtoms de distints elements els que conformen la base), tenim que considerar la contribució a la matriu dinàmica de l'àtom que estamus considerant de la cel·la $\mathbf{0}$. Esta contribució podem derivar-la de la condició d'estabilitat, Si es desplaça el cristall com un tot no canvia l'energía potencial, cosa que implica s'ha de complir:

Podem tindre en compte altres simetries del cristall per determinar certes propietats del tensor de forces o de la seua transformada de Fourier, la matriu dinàmica (certes relacions entre les components ...) però per ara sols tindrem en compte que la matriu dinàmica es una matri hermítica, i per tant els seus valors propis, ω^2 tenen que ser reals.

Tenim per tant que la matriu dinàmica serà una matriu 6×6 hermítica. Però donat que les components en z d'esta matriu es troben desacoblades podem tractar aquestes vibracions de manera independent.

2.3 Vibracions transversales fora de pla

Donat que en el nostre model, per com hem construït la matriu dinàmica, les vibracions fora de pla són independents de les interplanars passem a estudiar-les.

2.3.1 En $\Gamma(k_x = 0, k_y = 0)$

Al punt Γ , ($q_x = 0, q_y = 0$), la matriu dinàmica per a les vibracions fora de pla pren el valor:

$$\begin{pmatrix} -\frac{3\phi_{1,to}^{BN}}{\sqrt{M_B M_N}} - \frac{3\phi_{3,to}^{BN}}{\sqrt{M_B M_N}} & \frac{3\phi_{1,to}^{BN}}{\sqrt{M_B M_N}} + \frac{3\phi_{3,to}^{BN}}{\sqrt{M_B M_N}} \\ \frac{3\phi_{1,to}^{BN}}{\sqrt{M_B M_N}} + \frac{3\phi_{3,to}^{BN}}{\sqrt{M_B M_N}} & -\frac{3\phi_{1,to}^{BN}}{\sqrt{M_B M_N}} - \frac{3\phi_{3,to}^{BN}}{\sqrt{M_B M_N}} \end{pmatrix} \quad (16)$$

i es seus valors propis son:

$$\begin{aligned} \omega_{ZO}^2(\Gamma) &= -\frac{6(\phi_{1,to}^{BN} + \phi_{3,to}^{BN})}{\sqrt{M_B M_N}} \\ \omega_{ZA}^2(\Gamma) &= 0 \end{aligned}$$

2.3.2 En $K(q_x = 4\pi/(3a), q_y = 0)$

Els valors propis de la matriu dinàmica en aquest punt són:

$$\begin{aligned} \omega_{ZO}^2(K) &= -\frac{3(M_N\phi_{1,to}^{BN} + M_N\phi_{3,to}^{BN} + 3\sqrt{M_B M_N}\phi_{2,to}^{NN})}{\sqrt{M_B M_N}M_N} \\ \omega_{ZA}^2(K) &= -\frac{3(M_B\phi_{1,to}^{BN} + M_B\phi_{3,to}^{BN} + 3\sqrt{M_B M_N}\phi_{2,to}^{BB})}{\sqrt{M_B M_N}M_B} \end{aligned}$$

Podem observar que en el cas del BN , a diferència del cas del gràfic, obtenim 2 freqüències distintes al punt K degut a que en la base tenim dos àtoms distintes.

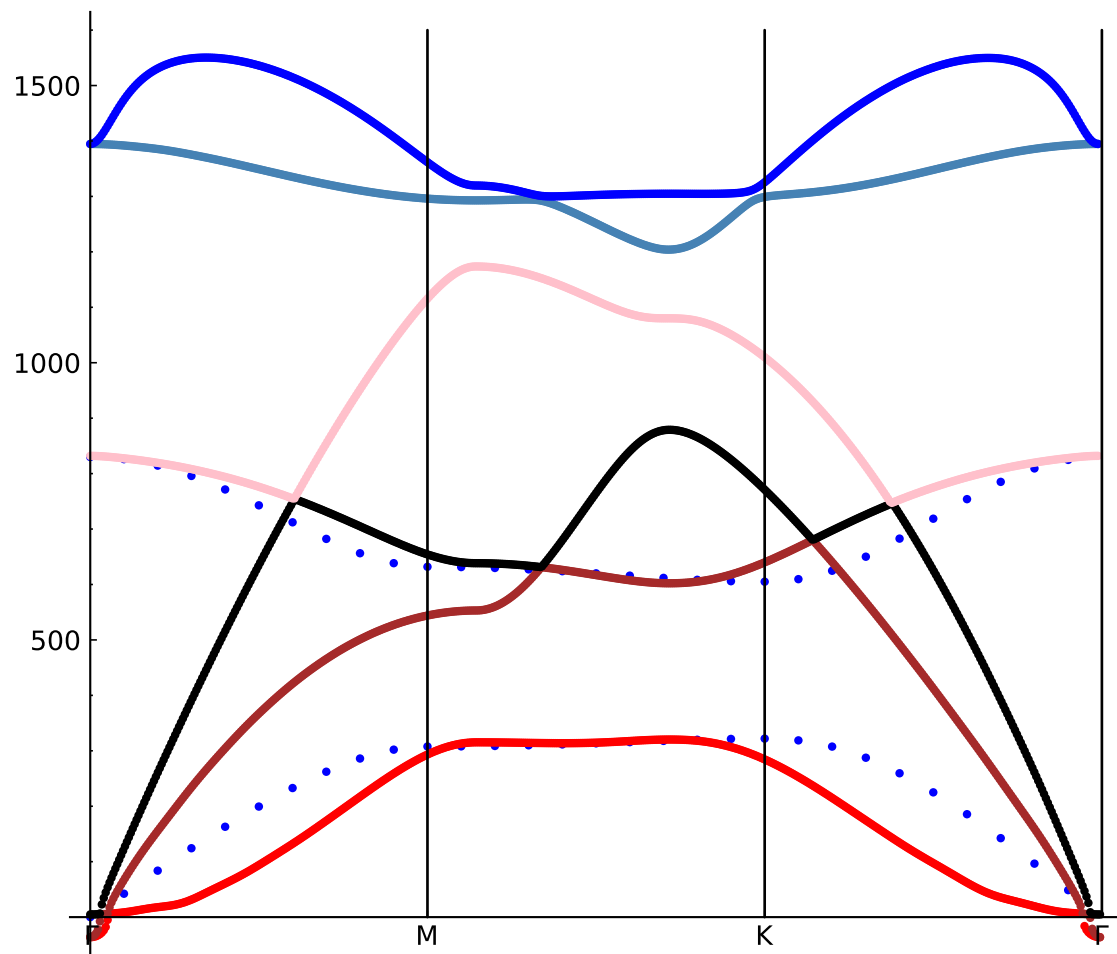
2.3.3 En el punt $M(q_x = \pi/a, q_y = \pi/(\sqrt{3}a))$

$$\begin{aligned} \omega_{ZO}^2(M) &= -\frac{3(\phi_{1,to}^{BN} + \phi_{3,to}^{BN})}{\sqrt{M_B M_N}} - \frac{4\phi_{2,to}^{BB}}{M_B} - \frac{4\phi_{2,to}^{NN}}{M_N} - \frac{\sqrt{M_B M_N(\phi_{1,to}^{BN} - 3\phi_{3,to}^{BN})^2 + 16(M_N\phi_{2,to}^{BB} - M_B\phi_{2,to}^{NN})^2}}{M_B M_N} \\ \omega_{ZA}^2(M) &= -\frac{3(\phi_{1,to}^{BN} + \phi_{3,to}^{BN})}{\sqrt{M_B M_N}} - \frac{4\phi_{2,to}^{BB}}{M_B} - \frac{4\phi_{2,to}^{NN}}{M_N} + \frac{\sqrt{M_B M_N(\phi_{1,to}^{BN} - 3\phi_{3,to}^{BN})^2 + 16(M_N\phi_{2,to}^{BB} - M_B\phi_{2,to}^{NN})^2}}{M_B M_N} \end{aligned}$$

Comprobem que les expressions obtingudes es redueixen a les que apareixen en la ref: Falkowsky en el cas que es àtoms de la base foren iguals.

De manera que los valores que obtenemos para las cuatro constantes de fuerza consideradas son:

$$\begin{aligned} \phi_{1,to}^{BN} &= (-1.36116402436406 \times 10^6) & \phi_{2,to}^{NN} &= (-33577.1725) \\ \phi_{2,to}^{BB} &= 289213.46955555555 & \phi_{3,to}^{BN} &= (-51717.6151722642) \end{aligned}$$



Y les relacions de dispersió per als modes ZO i ZA tenen la forma:
 Passem ara a estudiar les vibracions dins del pla del cristall.

2.4 Vibracions dins del pla del cristall

En este cas tractem amb una matriu 4×4 , i per tant tenim 4 valors propis (ω^2)

2.4.1 Al punt Γ

Al punt Γ obtinc 2 valors propis, de multiplicitat 2 cadascun:

$$\omega_{1,2}^2(\Gamma) = -\frac{3(\phi_{1,r}^{BN} + \phi_{1,ti}^{BN} + \phi_{3,r}^{BN} + \phi_{3,ti}^{BN})}{\sqrt{M_B M_N}}$$

$$\omega_{3,4}^2(\Gamma) = 0$$

El programa (escrit en python emprant [sagemath](#), que per a la diagonalització de matrius empra el programa [maxima](#)) no consigué trobar un resultat analític *sencill* per als valors propis de la matriu dinàmica als punts M i K , de manera que anem a intentar obtindre algun resultat aproximat realitzant algunes simplificacions; en particular anem a considerar:

- Les masses dels àtoms són iguals $M_N = M_B$
- Les constants de força entre àtoms del mateix tipus són també iguals: $\phi_{2,r}^{NN} = \phi_{2,r}^{BB}$, $\phi_{2,ti}^{NN} = \phi_{2,ti}^{BB}$

Emprant aquestes aproximacions (més endavant veurem que no fa falta fer tantes simplificacions, podem no igualar alguna de les dues constants anteriors), obtenim

2.4.2 Al punt M

Obtinc 4 valors propis distints, cosa que sembla raonable observant la gràfica de les dades proporcionades.

$$\omega_1^2(\Gamma) = -\frac{3\phi_{1,r}^{BN} + \phi_{1,ti}^{BN} + 2\phi_{2,r}^{BB} + 6\phi_{2,ti}^{BB}}{M_B}$$

$$\omega_2^2(\Gamma) = -\frac{\phi_{1,r}^{BN} + 3\phi_{1,ti}^{BN} + 6\phi_{2,r}^{BB} + 2\phi_{2,ti}^{BB}}{M_B}$$

$$\omega_3^2(\Gamma) = -\frac{2\phi_{1,r}^{BN} + 6\phi_{2,r}^{BB} + 2\phi_{2,ti}^{BB} + 3\phi_{3,r}^{BN} + 3\phi_{3,ti}^{BN}}{M_B}$$

$$\omega_4^2(\Gamma) = -\frac{2\phi_{1,ti}^{BN} + 2\phi_{2,r}^{BB} + 6\phi_{2,ti}^{BB} + 3\phi_{3,r}^{BN} + 3\phi_{3,ti}^{BN}}{M_B}$$

2.4.3 Al punt K

En este punt el programa en dona 3 valors propis, un d'ells amb multiplicitat 2, i observant la gràfica de les dades proporcionades sembla també raonable que en primera aproximació un dels valors propis estiga degenerat (podem observar que tenim 2 freqüències al punt K molt pròxims entre ells)

$$\begin{aligned}\omega_1^2(\Gamma) &= -\frac{3(2\phi_{1,ti}^{BN} + 3\phi_{2,r}^{BB} + 3\phi_{2,ti}^{BB} + 2\phi_{3,ti}^{BN})}{2M_B} \\ \omega_2^2(\Gamma) &= -\frac{3(2\phi_{1,r}^{BN} + 3\phi_{2,r}^{BB} + 3\phi_{2,ti}^{BB} + 2\phi_{3,r}^{BN})}{2M_B} \\ \omega_{3,4}^2(\Gamma) &= -\frac{3(\phi_{1,r}^{BN} + \phi_{1,ti}^{BN} + 3\phi_{2,r}^{BB} + 3\phi_{2,ti}^{BB} + \phi_{3,r}^{BN} + \phi_{3,ti}^{BN})}{2M_B}\end{aligned}$$

Passem ara a intentar calcular els valors de les constants de força, emprant els valors de les freqüències dels modes de vibració en estes punts de la primera zona de Brillouin.

Referències

- [1] Minko Balkanski. Physical properties of carbon nanotubes, edited by r. saito, g. dresselhaus and m.s. dresselhaus, imperial college press, london, 1998. *Materials Science and Engineering: B*, 76(3):241–242, Jul 2000.
- [2] M. Born and R. Oppenheimer. Zur quantentheorie der molekeln. *Annalen der Physik*, 389(20):457–484, 1927. PDF of an english translation by S.M. Blinder is available.
- [3] Max Born and Th. V. Kármán. Über Schwingungen in Raumgittern. (German) [On vibrations in space lattices]. *j-PHYSIKAL-Z*, 13(8):297–309, April 1912.
- [4] Ludger Wirtz and Angel Rubio. The phonon dispersion of graphite revisited. *Solid State Communications*, 131(3-4):141–152, 2004.