BLOC IV
FONONS

4.1. En molts casos les relacions de dispersió experimentals es poden reproduir molt bé si se suposa que els ions i el núvol dels electrons de valència tenen desplaçaments diferents (modes de respiració). Considereu una cadena lineal monoatòmica amb separació d'equilibri a i suposeu que cada ió, de massa M, només interacciona amb el seu núvol electrònic, de massa m, de manera que la força és proporcional al desplaçament relatiu dels seus centres de masses, essent C_2 la constant de força, mentre que els núvols electrònics d'àtoms veïns interaccionen amb una constant de força C_1. Si els desplaçaments dels ions i dels núvols electrònics de l'àtom n-èsim respecte de les posicions d'equilibri corresponents són de la forma $u_{n\alpha} = A_\alpha \exp\{\imath(qna - \omega t)\}$, on $\alpha =$ I per als ions i N per als núvols electrònics:

a) Determineu les equacions del moviment.

b) Demostreu que la relació de dispersió ve donada per l'expressió

$$\omega^2(q) = \left(\frac{1}{2mM}\right)\left\{C_2(m+M) + 4MC_1\sin^2\frac{qa}{2} \pm \left[\left(C_2(m+M) + 4MC_1\sin^2\frac{qa}{2}\right)^2 - 16mMC_1C_2\sin^2\frac{qa}{2}\right]^{1/2}\right\}$$

c) Sabent que $m \ll M$, demostreu que la relació de dispersió per a la branca acústica es pot aproximar per

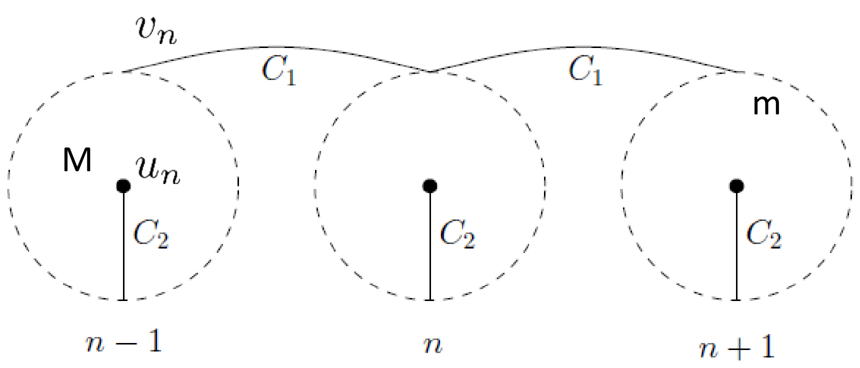
$$\omega^2(q) \approx \frac{4C_1}{M}\,\frac{C_2\sin^2(qa/2)}{C_2 + 4C_1\sin^2(qa/2)}.$$

d) Trobeu en aquest límit la velocitat del so i la freqüència màxima, sabent que

$$\frac{\partial\omega^2}{\partial q} = 2\omega\frac{\partial\omega}{\partial q}.$$

e) Compareu els resultats obtinguts amb els que es troben per al cas d'àtoms rígids.

a) Determineu les equacions del moviment.



Equacions del moviment:

Inter amb Núvols propi

Ió n:
Núvol n:

$$\begin{cases} M\ddot{u}_n = C_2\left(v_n - u_n\right) \\ m\ddot{v}_n = C_1\left[\left(v_{n+1} - v_n\right) + \left(v_{n-1} - v_n\right)\right] + C_2\left(u_n - v_n\right) \end{cases}$$

Inter amb Núvols veïns *Inter amb propi ió*

Ió n:
Núvol n:

$$\begin{cases} u_n = A\exp[i(\vec{k}\cdot\vec{r}_n - \omega t)] = A\exp[i(qna - \omega t)] \\ v_n = B\exp[i(\vec{k}\cdot\vec{r}_n - \omega t)] = B\exp[i(qna - \omega t)] \end{cases}$$

$\vec{r}_n = an\hat{x}$ i $\vec{k} = q\hat{x}$

a) Determineu les equacions del moviment.

Substituïnt:

$$\begin{cases} -\omega^2 M A e^{iqna} e^{-i\omega t} & = C_2 \left(B e^{iqna} e^{-i\omega t} - A e^{iqna} e^{-i\omega t} \right) \\ -\omega^2 m B e^{iqna} e^{-i\omega t} & = C_1 \left[\left(B e^{iq(n+1)a} e^{-i\omega t} - B e^{iqna} e^{-i\omega t} \right) \right. \\ & \quad \left. + \left(B e^{iq(n-1)a} e^{-i\omega t} - B e^{iqna} e^{-i\omega t} \right) \right] \\ & \quad + C_2 \left(A e^{iqna} e^{-i\omega t} - B e^{iqna} e^{-i\omega t} \right) \end{cases}$$

Simplificant factors:

$$\begin{cases} -\omega^2 M A & = C_2 (B - A) \\ -\omega^2 m B & = C_1 B (e^{iqa} + e^{-iqa} - 2) + C_2 (A - B) \end{cases}$$

$$e^{iqa} + e^{-iqa} - 2 = 2(\cos(qa) - 1) = -4 \sin^2\left(\frac{qa}{2}\right)$$

$$\boxed{\begin{aligned} -\omega^2 M A &= C_2 (B - A) \\ -\omega^2 m B &= -4 C_1 B \sin^2\left(\frac{qa}{2}\right) + C_2 (A - B) \end{aligned}}$$

➢ Problema 4.1, apartat b)

b) Demostreu que la relació de dispersió ve donada per l'expressió

$$\omega^2(q) = \left(\frac{1}{2mM}\right)\left\{C_2(m+M) + 4MC_1\sin^2\frac{qa}{2} \pm \left[\left(C_2(m+M) + 4MC_1\sin^2\frac{qa}{2}\right)^2 - 16mMC_1C_2\sin^2\frac{qa}{2}\right]^{1/2}\right\}$$

$$\begin{cases} -\omega^2 MA = C_2(B-A) \\ -\omega^2 mB = -4C_1 B\sin^2\left(\dfrac{qa}{2}\right) + C_2(A-B) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} (-\omega^2 M + C_2)A - C_2 B = 0 \\ -C_2 A + (C_2 - \omega^2 m + 4C_1\sin^2\left(\dfrac{qa}{2}\right))B = 0 \end{cases} \Rightarrow$$

Sistema homogeni

Trobem la solució:

$$\begin{vmatrix} \omega^2 M - C_2 & C_2 \\ C_2 & \omega^2 m - 4C_1\sin^2\left(\frac{qa}{2}\right) - C_2 \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow$$

$$(\omega^2 M - C_2)\left(\omega^2 m - 4C_1\sin^2\left(\frac{qa}{2}\right) - C_2\right) - C_2^2 = \omega^4 mM - 4\omega^2 MC_1\sin^2\left(\frac{qa}{2}\right)$$

$$-\omega^2 MC_2 - \omega^2 mC_2 + 4C_1C_2\sin^2\left(\frac{qa}{2}\right) + C_2^2 - C_2^2 = 0$$

$$\omega^4 mM - \omega^2\left(4MC_1\sin^2\left(\frac{qa}{2}\right) + C_2(M+m)\right) + 4C_1C_2\sin^2\left(\frac{qa}{2}\right) = 0$$

$$\boxed{\omega^2 = \frac{1}{2Mm}\left[4MC_1\sin^2\left(\frac{qa}{2}\right) + C_2(M+m) \pm\sqrt{\left(4MC_1\sin^2\left(\frac{qa}{2}\right) + C_2(M+m)\right)^2 - 16MmC_1C_2\sin^2\left(\frac{qa}{2}\right)}\right]}$$

c) Sabent que $m \ll M$, demostreu que la relació de dispersió per a la branca acústica es pot aproximar per

$$\omega^2(q) \approx \frac{4C_1}{M} \frac{C_2 \sin^2(qa/2)}{C_2 + 4C_1 \sin^2(qa/2)}.$$

Branca acústica: solució amb signe negatiu

$$\omega_-^2 = \frac{1}{2Mm}\left[4MC_1 \sin^2\left(\frac{qa}{2}\right) + C_2(M+m) - \sqrt{\left(4MC_1 \sin^2\left(\frac{qa}{2}\right) + C_2(M+m)\right)^2 - 16MmC_1C_2 \sin^2\left(\frac{qa}{2}\right)}\right]$$

Factoritzem M^2 a l'arrel

$$\omega_-^2 = \frac{1}{2Mm}\left[4MC_1 \sin^2\left(\frac{qa}{2}\right) + MC_2\frac{(M+m)}{M} - \sqrt{M^2\left(4C_1 \sin^2\left(\frac{qa}{2}\right) + C_2\frac{M+m}{M}\right)^2 - 16M^2\frac{m}{M}C_1C_2 \sin^2\left(\frac{qa}{2}\right)}\right]$$

Eliminem M

$$\omega_-^2 = \frac{1}{2m}\left[4C_1 \sin^2\left(\frac{qa}{2}\right) + C_2\frac{(M+m)}{M} - \sqrt{\left(4C_1 \sin^2\left(\frac{qa}{2}\right) + C_2\frac{M+m}{M}\right)^2 - 16\frac{m}{M}C_1C_2 \sin^2\left(\frac{qa}{2}\right)}\right]$$

$\frac{M+m}{M} \approx 1$

$$\omega_-^2 \simeq \frac{1}{2m}\left[4C_1 \sin^2\left(\frac{qa}{2}\right) + C_2 - \sqrt{\left(4C_1 \sin^2\left(\frac{qa}{2}\right) + C_2\right)^2 - 16\frac{m}{M}C_1C_2 \sin^2\left(\frac{qa}{2}\right)}\right]$$

Factoritzem

$$\omega_-^2 = \frac{1}{2m}\left(4C_1 \sin^2\left(\frac{qa}{2}\right) + C_2\right)\left[1 - \sqrt{1 - \frac{m}{M}\frac{16C_1C_2 \sin^2\left(\frac{qa}{2}\right)}{\left(4C_1 \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right) + C_2\right)^2}}\right]$$

➢ Problema 4.1, apartat c)

$$\omega_-^2 = \frac{1}{2m}\left(4C_1\sin^2\left(\frac{qa}{2}\right)+C_2\right)\left[1-\sqrt{1-\frac{m}{M}\frac{16C_1C_2\sin^2\left(\frac{qa}{2}\right)}{\left(4C_1\sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)+C_2\right)^2}}\right]$$

Per simplificar la notació, definim: $\alpha \equiv 4\frac{C_1}{C_2}\sin^2\left(\frac{qa}{2}\right) > 0$

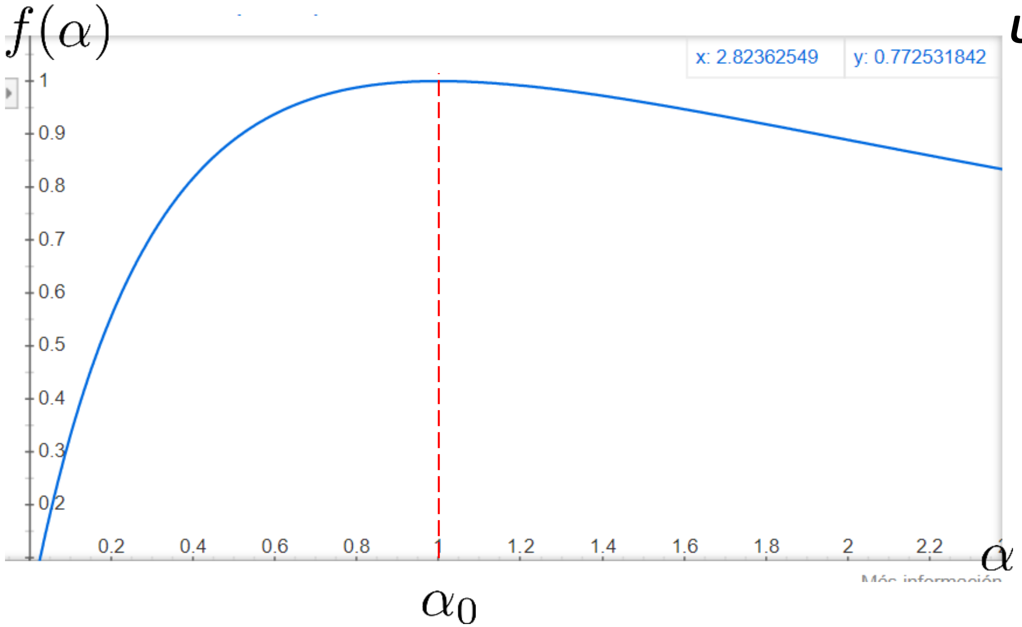
$$\omega_-^2 = \frac{C_2}{2m}(1+\alpha)\left[1-\sqrt{1-\frac{m}{M}\frac{4\alpha}{(1+\alpha)^2}}\right]$$

Ara mirarem d'aproximar l'expressió per m<<M.

$$\sqrt{1+x} \approx 1+x/2$$

$$\omega_-^2 \approx \frac{C_2}{2m}(1+\alpha)\left[1-\left(1-\frac{1}{2}\frac{m}{M}\frac{4\alpha}{(1+\alpha)^2}\right)\right] = \frac{C_2}{M}\frac{\alpha}{(1+\alpha)}$$

$$\boxed{\omega_-^2 \approx \frac{4C_1C_2}{M}\frac{\sin^2(qa/2)}{C_2+4C_1\sin^2(qa/2)}}$$



Un detall addicional sobre la funció a dins l'arrel:

$$f(\alpha) = \frac{4\alpha}{(1+\alpha)^2}$$

$$\frac{df(\alpha)}{d\alpha} = \frac{4}{(1+\alpha)^2} - \frac{8\alpha}{(1+\alpha)^3}$$

$$\left.\frac{df(\alpha)}{d\alpha}\right|_{\alpha_0} = 0 \to 4\left(1+\alpha_0\right) = 8\alpha_0 \to \alpha_0 = 1$$

La funció $f(\alpha)$ té un extrem en $\alpha_0 = 1$, determinem la seva naturalesa

$$\frac{d^2 f(\alpha)}{d\alpha^2} = -\frac{16}{(1+\alpha)^3} + \frac{24\alpha}{(1+\alpha)^4}$$

$$\left.\frac{d^2 f(\alpha)}{d\alpha^2}\right|_{\alpha_0} = -\frac{16}{2^3} + \frac{24}{2^4} = -\frac{1}{2} < 0$$

és un màxim. Per tant $f(\alpha) \leq f\left(\alpha_0\right) = 1 \Rightarrow \frac{m}{M}\frac{4\alpha}{(1+\alpha)^2} \to 0$ i podem desenvolupar en Taylor.

d) Trobeu en aquest límit la velocitat del so i la freqüència màxima, sabent que

$$\frac{\partial \omega^2}{\partial q} = 2\omega \frac{\partial \omega}{\partial q}.$$

$$\omega_-^2 \approx \frac{4C_1C_2}{M}\frac{\sin^2(qa/2)}{C_2+4C_1\sin^2(qa/2)} = \frac{4C_1C_2}{M}\frac{x}{C_2+4C_1x}$$

$$x = \sin^2(qa/2)$$

1) Calculem primer la velocitat de grup fent:

$$v_{\mathrm{g}} = \frac{\partial \omega}{\partial q} = \frac{1}{2\omega}\frac{d\omega^2}{dq}, \qquad \frac{\partial \omega^2}{\partial q} = \frac{\partial \omega^2}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial q}$$

$$\left.\begin{aligned} \frac{\partial \omega^2}{\partial x} &= \frac{4C_1C_2}{M}\frac{C_2}{(C_2+4C_1x)^2} = \frac{4C_1}{M}\frac{1}{(1+4\,(C_1/C_2)\,x)^2} \\ \frac{\partial x}{\partial q} &= 2\sin(qa/2)\cos(qa/2)\frac{a}{2} \end{aligned}\right\} \Rightarrow \frac{\partial \omega^2}{\partial q} = \frac{4C_1a}{M}\frac{\sin(qa/2)\cos(qa/2)}{\left(1+4\,(C_1/C_2)\sin^2(qa/2)\right)^2} \Rightarrow$$

$$v_{\mathrm{g}} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{M}{4C_1}}\frac{\left(1+4\,(C_1/C_2)\sin^2(qa/2)\right)^{1/2}}{\sin(qa/2)}\frac{4C_1a}{M}\frac{\sin(qa/2)\cos(qa/2)}{\left(1+4\,(C_1/C_2)\sin^2(qa/2)\right)^2}$$

$$\boxed{v_{\mathrm{g}} = a\sqrt{\frac{C_1}{M}}\frac{\cos(qa/2)}{\left(1+4\,(C_1/C_2)\sin^2(qa/2)\right)^{3/2}}}$$

2) Calculem la velocitat del so fent el limit:

$$v_{\rm so} = \lim_{q\to 0} v_{\rm g} = \lim_{q\to 0} a\sqrt{\frac{C_1}{M}} \frac{1+(qa)^2/8}{\left(1+4\,(C_1/C_2)\,(aq/2)^2\right)^{3/2}} \Rightarrow \boxed{v_{\rm so} = a\sqrt{\frac{C_1}{M}}}$$

Desenv. sin i cos

3) La freqüència màxima la trobem imposant $\partial\omega/\partial k = v_{\rm g} = 0$ a la relació de dispersió (apartat c)

$$\cos(aq/2) = 0 \to \sin(aq/2) = \pm 1 \Rightarrow \boxed{\omega_{\rm max} = \sqrt{\frac{4C_1}{M}} \frac{1}{\sqrt{1+4C_1/C_2}}}$$

e) Compareu els resultats obtinguts amb els que es troben per al cas d'àtoms rígids.

Per àtoms rígids tenim $C_2 \to \infty$

$$\omega = \sqrt{\frac{4C_1}{M}}|\sin(qa/2)|$$

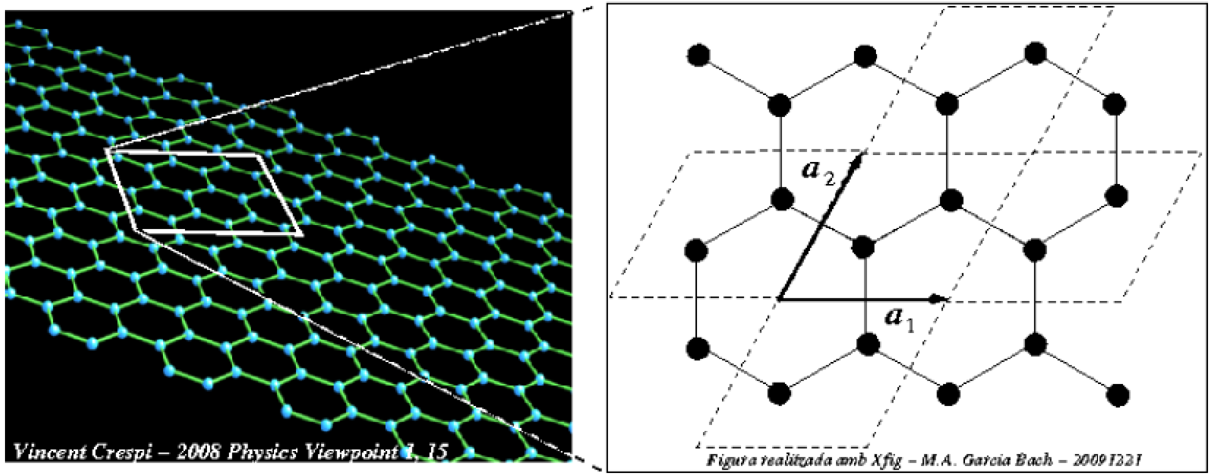
$$\omega_{\rm max} = \sqrt{\frac{4C_1}{M}}$$

$$v_{\rm g} = a\sqrt{\frac{C_1}{M}}|\cos(qa/2)|$$

$$v_{\rm so} = a\sqrt{\frac{C_1}{M}},$$

resultats que coincideixen amb els obtinguts a teoria.

4.2. 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 $\vec{r}_1 = (\vec{a}_1 + \vec{a}_2)/3$ i $\vec{r}_2 = 2(\vec{a}_1 + \vec{a}_2)/3$, respectivament, on $\vec{a}_1 = a\hat{x}$ i $\vec{a}_2 = (a/2)(\hat{x} + \sqrt{3}\hat{y})$ (vegeu la figura 5). 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 limitem a aquestes vibracions transversals:



a) Quantes branques i de quina natura (acústiques o òptiques) hi haurà a la relació de dispersió?

b) Quines seran les equacions del moviment dels àtoms?

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

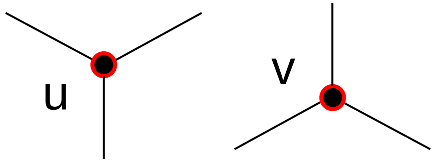
d) Trobeu el límit de la relació de dispersió corresponent a la branca acústica per a longituds d'ona llargues.

e) Quina serà la velocitat de propagació de les ones elàstiques en aquest límit?

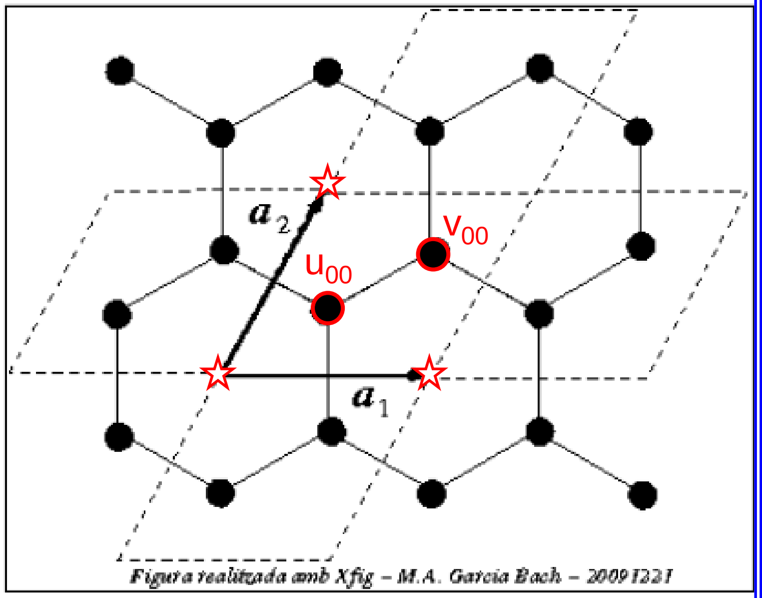
a) Quantes branques i de quina natura (acústiques o òptiques) hi haurà a la relació de dispersió?

- Número branques acústiques: dimensionalitat del moviment = 1 (perp. al pla del grafè)

- Àtoms de la base són iguals, però entorn és diferent $\Rightarrow$ amplituds diferents u,v $\Rightarrow$
$\Rightarrow$ branca òptica $\Rightarrow$ p=2

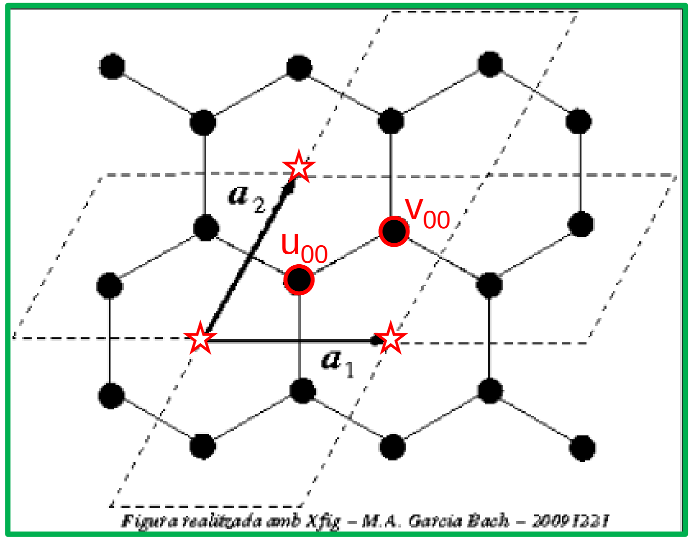


- Recompte de branques: pD= 2·1= 2 branques (A i Ò)

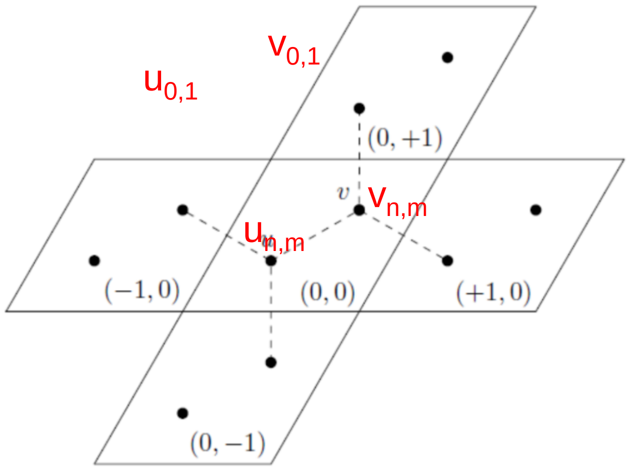


$$\begin{cases} \vec{r}_1 = (\vec{a}_1 + \vec{a}_2)/3 \\ \vec{r}_2 = 2(\vec{a}_1 + \vec{a}_2)/3 \end{cases}$$

b) Quines seran les equacions del moviment dels àtoms?



Etiquetem les cel·les amb una parella d'enters (n,m)



Busquem modes normals de vibració:

$$\begin{cases} u_{n,m} = A\exp[i(\vec{k}\cdot\vec{r}_{n,m} - \omega t)] \\ v_{n,m} = B\exp[i(\vec{k}\cdot\vec{r}_{n,m} - \omega t)] \end{cases}$$

Eq's mov. per àtoms de la cel·la (0,0) tenant en compte els 3 veins que tenen cadascun:

Pròpia cel·la *Cel·la esq.* *Cel·la down*

$$\begin{cases} m\ddot{u}_{0,0} = C\left((v_{0,0} - u_{0,0}) + (v_{-1,0} - u_{0,0}) + (v_{0,-1} - u_{0,0})\right) \\ m\ddot{v}_{0,0} = C\left((u_{0,0} - v_{0,0}) + (u_{+1,0} - v_{0,0}) + (u_{0,+1} - v_{0,0})\right) \end{cases}$$

Pròpia cel·la *Cel·la dr.* *Cel·la up*

$$\begin{cases} m\ddot{u}_{0,0} = C\left(v_{0,0} + v_{-1,0} + v_{0,-1} - 3u_{0,0}\right) \\ m\ddot{v}_{0,0} = C\left(u_{0,0} + u_{+1,0} + u_{0,+1} - 3v_{0,0}\right) \end{cases}$$

b) Quines seran les equacions del moviment dels àtoms?

Desplaçaments de cada àtom ($R_{n,m}$ és la posició de la cel·la; r_1, r_2 la de cadascun dels 2 àtoms respecte la cel·la):

$$\begin{cases} u_{n,m} = A' \exp[i(\vec{k}\cdot\vec{r}_{n,m} - \omega t)] = A' \exp[i(\vec{k}\cdot(\vec{R}_{n,m} + \vec{r}_1) - \omega t)] = A \exp[i(\vec{k}\cdot\vec{R}_{n,m} - \omega t)] \\ v_{n,m} = B' \exp[i(\vec{k}\cdot\vec{r}_{n,m} - \omega t)] = B' \exp[i(\vec{k}\cdot(\vec{R}_{n,m} + \vec{r}_2) - \omega t)] = B \exp[i(\vec{k}\cdot\vec{R}_{n,m} - \omega t)] \end{cases}$$

$$\begin{cases} m\ddot{u}_{0,0} = C\left(v_{0,0} + v_{-1,0} + v_{0,-1} - 3u_{0,0}\right) \\ m\ddot{v}_{0,0} = C\left(u_{0,0} + u_{+1,0} + u_{0,+1} - 3v_{0,0}\right) \end{cases} \longrightarrow \begin{cases} -m\omega^2 A = C\left(B + Be^{-i\vec{k}\cdot\vec{a}_1} + Be^{-i\vec{k}\cdot\vec{a}_2} - 3A\right) \\ -m\omega^2 B = C\left(A + Ae^{-i\vec{k}\cdot\vec{a}_1} + Ae^{-i\vec{k}\cdot\vec{a}_2} - 3B\right) \end{cases}$$

$$\vec{R}_{0,0} = \vec{0}$$
$$\vec{R}_{-1,0} = \vec{R}_{0,0} - \vec{a}_1 \ , \vec{R}_{+1,0} = \vec{a}_1$$
$$\vec{R}_{0,-1} = \vec{R}_{0,0} - \vec{a}_2 \ , \vec{R}_{0,+1} = \vec{a}_2$$

Agrupant sumands…

$$\boxed{\begin{cases} (m\omega^2 - 3C)A + \left(1 + e^{-i\vec{k}\cdot\vec{a}_1} + Be^{-i\vec{k}\cdot\vec{a}_2}\right) CB = 0 \\ \left(1 + e^{-i\vec{k}\cdot\vec{a}_1} + Be^{-i\vec{k}\cdot\vec{a}_2}\right) CA + (m\omega^2 - 3C)B = 0 \end{cases}}$$

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

A l'anterior sistema d'equacions, demanem que el determinant sigui 0:

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

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

$$\cos\left(\vec{k}\cdot\vec{a}_1\right) + \cos\left(\vec{k}\cdot\vec{a}_2\right) + \cos\left(\vec{k}\cdot(\vec{a}_1 - \vec{a}_2)\right) = \cos\left(ak_x\right) + \cos\left(\frac{ak_x}{2} + \frac{\sqrt{3}ak_y}{2}\right) + \cos\left(\frac{ak_x}{2} - \frac{\sqrt{3}ak_y}{2}\right) = \cos\left(ak_x\right) + 2\cos\left(\frac{ak_x}{2}\right)\cos\left(\frac{\sqrt{3}ak_y}{2}\right)$$

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

$$\boxed{\omega^2(k_x, k_y) = \frac{3C}{m} \pm \frac{C}{m}\left[3 + 2\left(\cos\left(ak_x\right) + 2\cos\left(ak_x/2\right)\cos\left(\sqrt{3}ak_y/2\right)\right)\right]^{1/2}}$$

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

$$\omega^2(k_x,k_y) = \frac{3C}{m} \pm \frac{C}{m}\left[3+2\left(\boxed{\cos(ak_x)+2\cos(ak_x/2)\cos\left(\sqrt{3}ak_y/2\right)}\right)\right]^{1/2}$$

Long. d'ona llargues equival a k→0:

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

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

Substituïm:

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

Ara desenvolupem l'arrel:

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

Finalment, la branca acústica per k → 0, és:

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

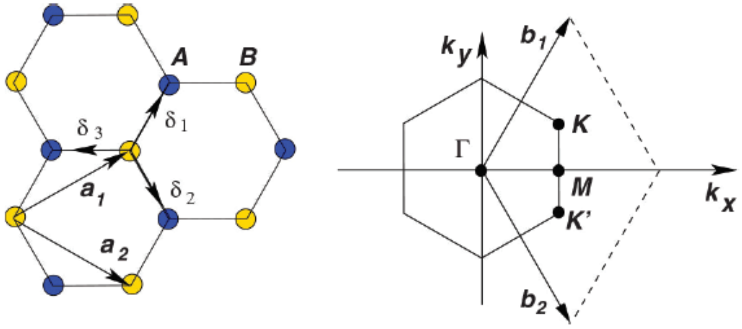
e) Quina serà la velocitat de propagació de les ones elàstiques en aquest límit?

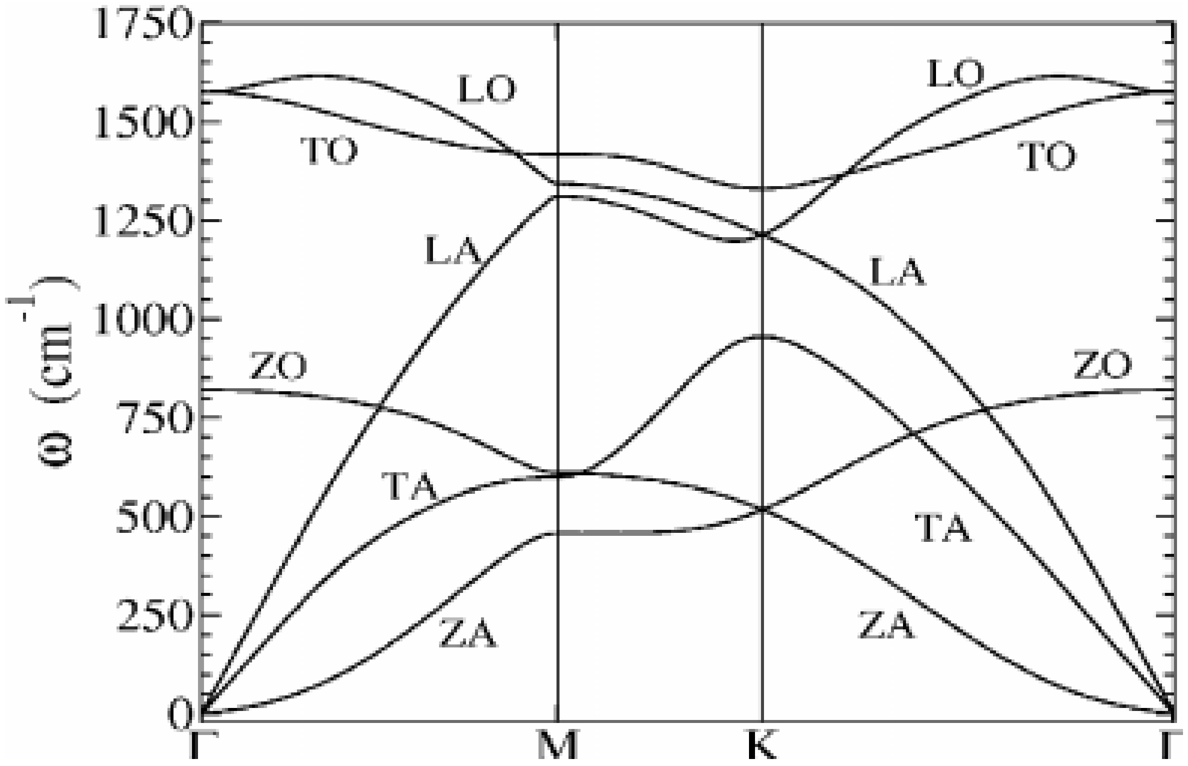
$$\vec{v}_g = \vec{\nabla}_{\vec{k}}\omega(\vec{k}) \xrightarrow{\text{components}} v_{so,i} = \frac{\partial \omega_-}{\partial k_i} = \sqrt{\frac{C}{m}}\frac{a}{2}\frac{k_i}{k} \longrightarrow \vec{v}_{so} = \sqrt{\frac{C}{m}}\frac{a}{2k}(k_x\hat{x}+k_y\hat{y})$$

$$k = \sqrt{k_x^2+k_y^2}$$

$$\boxed{v_{\text{so}} = \frac{\partial \omega}{\partial k} = \frac{a}{2}\sqrt{\frac{C}{m}}}$$

➢ Problema 4.2, apartats d), e)





2 branches (Acu. and Opt.) for out-of-plane (Z) motion

2 branches (2Acu. and 2Opt.) for in-plane transverse (T), and in-plane longitudinal (L) directions: 4 branches in total.

4.3. Un dels efectes de la superfície d'un sòlid sobre els modes de vibració és l'existència de modes de vibració localitzats. Aquests modes són oscil·lacions d'una freqüència ω superior al valor màxim de la freqüència d'un fonó ordinari, que s'esmorteeixen a l'allunyar-se de la superfície. Per estudiar-los considerem un model unidimensional senzill format per una cadena semiinfinita d'àtoms, $n = 0, 1, 2, 3...$ Els àtoms $n \geq 1$ estan distribuïts uniformement, a una distància entre primers veïns a, interaccionant a primers veïns amb constant C. Per contra, l'àtom a la superfície ($n = 0$) està a una distància $a' > a$ de l'àtom $n = 1$, amb el que interacciona amb una constant $C' \neq C$.

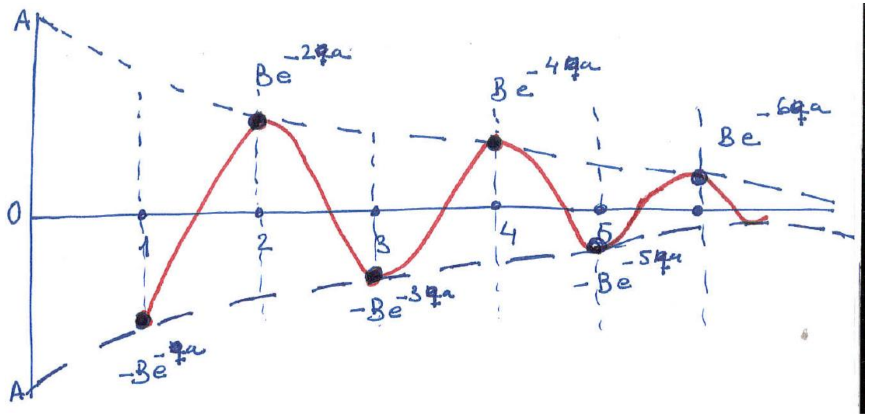
a) Raoneu per què el mode

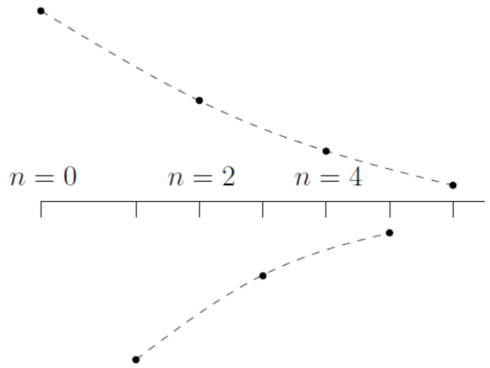
$$u_n = \begin{cases} A\mathrm{e}^{\imath\omega t}, & n = 0 \\ B(-1)^n \mathrm{e}^{-qna}\mathrm{e}^{\imath\omega t}, & n \neq 0 \end{cases}$$

és, en principi, una bona descripció d'un mode de superfície.

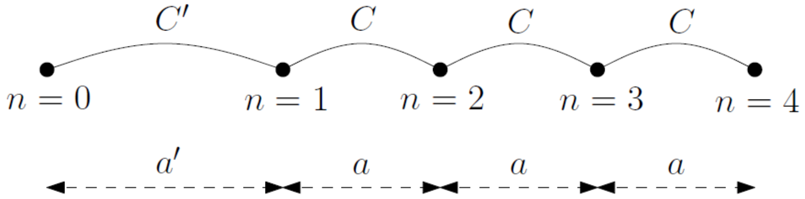
b) Determineu l'espectre de freqüències $\omega(q)$ d'aquests modes de superfície.

c) Demostreu que les condicions que les equacions del moviment imposen sobre A i B, juntament amb la relació de dispersió, impliquen que aquests modes només poden existir si $C' \geq 4C/3$.





b) Determineu l'espectre de freqüències $\omega(q)$ d'aquests modes de superfície.



Eq's. moviment:

$$\begin{cases} m\ddot{u}_0 = C'\left(u_1 - u_0\right) \\ m\ddot{u}_1 = C'\left(u_0 - u_1\right) + C\left(u_2 - u_1\right) \\ m\ddot{u}_n = C\left(\left(u_{n+1} - u_n\right) + \left(u_{n-1} - u_n\right)\right) \end{cases}$$

$$u_n = \begin{cases} Ae^{i\omega t} & n = 0 \\ B(-1)^n e^{-kna} e^{i\omega t} & n > 0 \end{cases}$$

Substituïm...

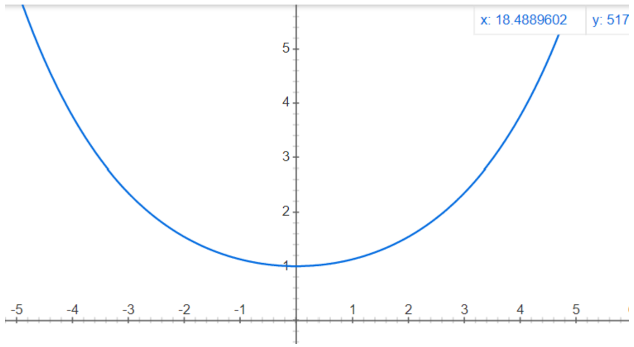
$$\begin{cases} -\omega^2 m A e^{i\omega t} = C'\left(-Be^{-ka}e^{i\omega t} - Ae^{i\omega t}\right) \\ \omega^2 m B e^{-ka} e^{i\omega t} = C'\left(Ae^{i\omega t} + Be^{-ka}e^{i\omega t}\right) + C\left(Be^{-2ka}e^{i\omega t} + Be^{-ka}e^{i\omega t}\right) \\ -\omega^2 m(-1)^n B e^{-kna} e^{i\omega t} = CB\left((-1)^{n+1}e^{-ik(n+1)a}e^{i\omega t} + (-1)^{n-1}e^{-ik(n-1)a}e^{i\omega t} - 2(-1)^n e^{-ikna}e^{i\omega t}\right) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \omega^2 m A = C'\left(A + Be^{-ka}\right) \\ \omega^2 m B = C'\left(Ae^{ka} + B\right) + CB\left(1 + e^{-ka}\right) \\ \boxed{\omega^2 m = C\left(e^{ka} + e^{-ka} + 2\right)} = 4C\cosh^2(ka/2) \end{cases}$$

$$\boxed{\omega(k) = 2\sqrt{\frac{C}{m}}\cosh\left(\frac{ka}{2}\right)}$$

$$e^{\theta} + e^{-\theta} = 2\cosh(\theta)$$

$$\cosh(2\theta) + 1 = 2\cosh^2(\theta/2)$$



Solució no trivial per A,B $\Rightarrow$

$$\begin{vmatrix} \omega^2 m - C' & -C' e^{-ka} \\ -C' e^{ka} & \omega^2 m - C' - C\left(1+e^{-ka}\right) \end{vmatrix} = 0$$

$$\left(\omega^2 m - C'\right)\left(\omega^2 m - C' - C\left(1+e^{-ka}\right)\right) - C'^2 = 0$$
$$\left(\omega^2 m\right)^2 - 2\omega^2 m C' + C'^2 - \omega^2 m C\left(1+e^{-ka}\right) + C'C\left(1+e^{-ka}\right) - C'^2 = 0$$
$$\underset{1}{\left(\omega^2 m\right)^2} - \underset{2}{\omega^2 m 2C'} - \underset{3}{\omega^2 m C\left(1+e^{-ka}\right)} + C'C\left(1+e^{-ka}\right) = 0$$

$$\Leftarrow \boxed{\omega^2 m = C\left(e^{ka} + e^{-ka} + 2\right)}$$

Veure pàg anterior

1 $$\left(\omega^2 m\right)^2 = C^2\left(e^{ka}+e^{-ka}+2\right)\left(e^{ka}+e^{-ka}+2\right)$$
$$= C^2\left(e^{2ka} + 1 + 2e^{ka} + 1 + e^{-2ka} + 2e^{-ka} + 2e^{ka} + 2e^{-ka} + 4\right)$$
$$= C^2\left(e^{2ka} + e^{-2ka} + 4\left(e^{ka}+e^{-ka}\right) + 6\right)$$

2 $$\omega^2 m 2C' = 2C'C\left(e^{ka}+e^{-ka}+2\right)$$
$$= C'C\left(2\left(e^{ka}+e^{-ka}\right)+4\right)$$

3 $$\omega^2 m C\left(1+e^{-ka}\right) = C^2\left(e^{ka}+e^{-ka}+2\right)\left(1+e^{-ka}\right)$$
$$= C^2\left(e^{ka} + 1 + e^{-ka} + e^{-2ka} + 2 + 2e^{-ka}\right)$$
$$= C^2\left(e^{ka} + 3e^{-ka} + e^{-2ka} + 3\right)$$

Reinserim ① ② ③ a l'expressió…

$$\left(\omega^2 m\right)^2 - \omega^2 m 2C' - \omega^2 m C\left(1+e^{-ka}\right) + C'C\left(1+e^{-ka}\right) = 0$$

① ② ③

$$C^2\left(e^{2ka}+e^{-2ka}+4e^{ka}+4e^{-ka}+6-e^{ka}-3e^{-ka}-e^{-2ka}-3\right)$$
$$+C'C\left(1+e^{-ka}-2e^{ka}-2e^{-ka}-4\right)=0$$
$$C^2\left(e^{2ka}+3e^{ka}+e^{-ka}+3\right)-C'C\left(2e^{ka}+e^{-ka}+3\right)=0$$

Traiem factor comú e^{-ka} // α=C'/C ….

$$\left(e^{3ka}+3e^{2ka}+3e^{ka}+1\right)-\alpha\left(2e^{2ka}+3e^{ka}+1\right)=0$$

Queda eq. cúbica per x= e^{ka}:

$$x^3+(3-2\alpha)x^2+3(1-\alpha)x+(1-\alpha)=0$$

Solucions…

$$x_1 = -1 \quad \textit{(ko)}$$
$$x_2 = \frac{2(\alpha-1)+\sqrt{4(1-\alpha)^2-4(1-\alpha)}}{2} = \alpha-1+\sqrt{\alpha(\alpha-1)}$$
$$x_3 = \frac{2(\alpha-1)-\sqrt{4(1-\alpha)^2-4(1-\alpha)}}{2} = \alpha-1-\sqrt{\alpha(\alpha-1)} \quad \textit{(ko, negativa)}$$

$$\alpha-1+\sqrt{\alpha(\alpha-1)}\geq 1$$
$$\sqrt{\alpha(\alpha-1)}\geq 2-\alpha$$
$$\alpha(\alpha-1)\geq(2-\alpha)^2$$
$$\alpha^2-\alpha\geq 4+\alpha^2-4\alpha$$
$$3\alpha\geq 4$$

$$\boxed{C'\geq\frac{4C}{3}}$$

4.4. Alguns metalls presenten una anomalia en les corbes de dispersió de fonons, $\omega(\vec{q})$, consistent en un canvi abrupte del pendent a l'entorn de certs vectors específics, $\vec{q}_0$. Aquest efecte s'anomena anomalia de Kohn, i es creu que és degut a la forma en què la interacció fonó-electró afecta les constants d'interacció. Com a model senzill per estudiar l'anomalia de Kohn es proposa un cristall unidimensional de paràmetre de xarxa a, base monoatòmica i constants d'interacció entre els ions n i $n' = n \pm p$, $p > 0$,

$$C_p = C\,\frac{\sin(p\,q_0\,a)}{pa}, \quad \forall p > 0,$$

essent C i q_0 constants característiques del metall.

a) Escriviu les equacions del moviment.

b) Trobeu la relació de dispersió, $\omega(q)$.

c) Demostreu que aquest model presenta una anomalia de Kohn en forma de tangent vertical a $\omega(q)$ en $q = q_0$. [Suggeriment: treballeu amb $\omega^2(q)$.]

Veure articles originals: Phys. Rev. Lett. 2, 393 (1959) i Phys. Rev. 126, 1693 (1962)
Enllaç explicatiu: link
Video relacionat sobre Peierls distorsion (by Nicola Spalding): link

➢ Problema 4.4

IMAGE OF THE FERMI SURFACE IN THE VIBRATION SPECTRUM OF A METAL*

W. Kohn
Department of Physics, Carnegie Institute of Technology, Pittsburgh, Pennsylvania
(Received April 6, 1959)

The lattice vibrations of the ions in a metal are partly screened by the conduction electrons. We shall see that this screening changes rather rapidly on certain surfaces in the space of phonon $\vec{q}$-vectors and that therefore on these surfaces the frequencies ω vary abruptly with $\vec{q}$. The calculations we have done give the result that $\omega(\vec{q})$ is a continuous function of $\vec{q}$ but that on the surfaces in question

$$|\mathrm{grad}_{\vec{q}}\,\omega(\vec{q})| = \infty. \qquad (1)$$

The location of these surfaces is entirely determined by the shape of the electronic Fermi surface, using a simple geometrical construction.

To explain the physical origin of this effect let us first describe the conduction electrons by a free electron gas, with Fermi wave number k_F. One then finds that an embedded charge distribution,

$$\rho_{\mathrm{ext}}(\vec{r}) = \rho_0 e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}, \qquad (2)$$

induces an electronic charge density

$$\rho_{\mathrm{el}}(\vec{r}) = -F(q)\rho_0 e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}, \qquad (3)$$

where

$$F(q) = \frac{1}{\pi a_0 q^2}\left[1 + \frac{k_F}{q}\left(1 - \frac{q^2}{4k_F^2}\right)\ln\left|\frac{q+2k_F}{q-2k_F}\right|\right]; \qquad (4)$$

here a_0 is the Bohr radius. Note that near $q = 2k_F$,

$$F(q) = \frac{1}{2\pi a_0 k_F}\left(1 + \frac{1}{2k_F}(q-2k_F)\ln|q-2k_F|\right), \qquad (5)$$

and

$$\frac{dF(q)}{dq} = \frac{1}{4\pi a_0 k_F^2}\ln|q-2k_F| \approx -\infty. \qquad (6)$$

The last equation shows an abrupt decrease of the ability of the electrons to screen the embedded charge distribution as soon as q exceeds $2k_F$. This is due to the fact that as long as $q < 2k_F$, $\rho_{\mathrm{ext}}(\vec{r})$ causes virtual excitations of some electrons with conservation of energy while when $q > 2k_F$ such excitations are no longer possible (see Fig. 1). Now a lattice vibration of wave vec-

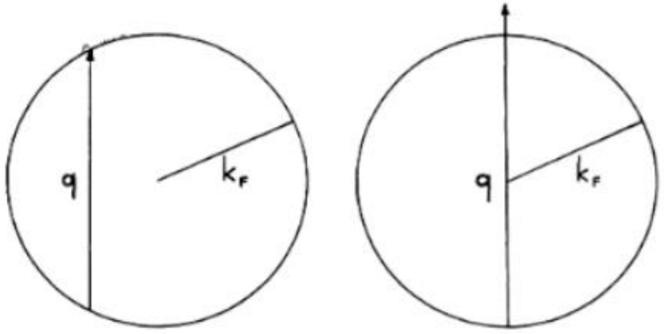
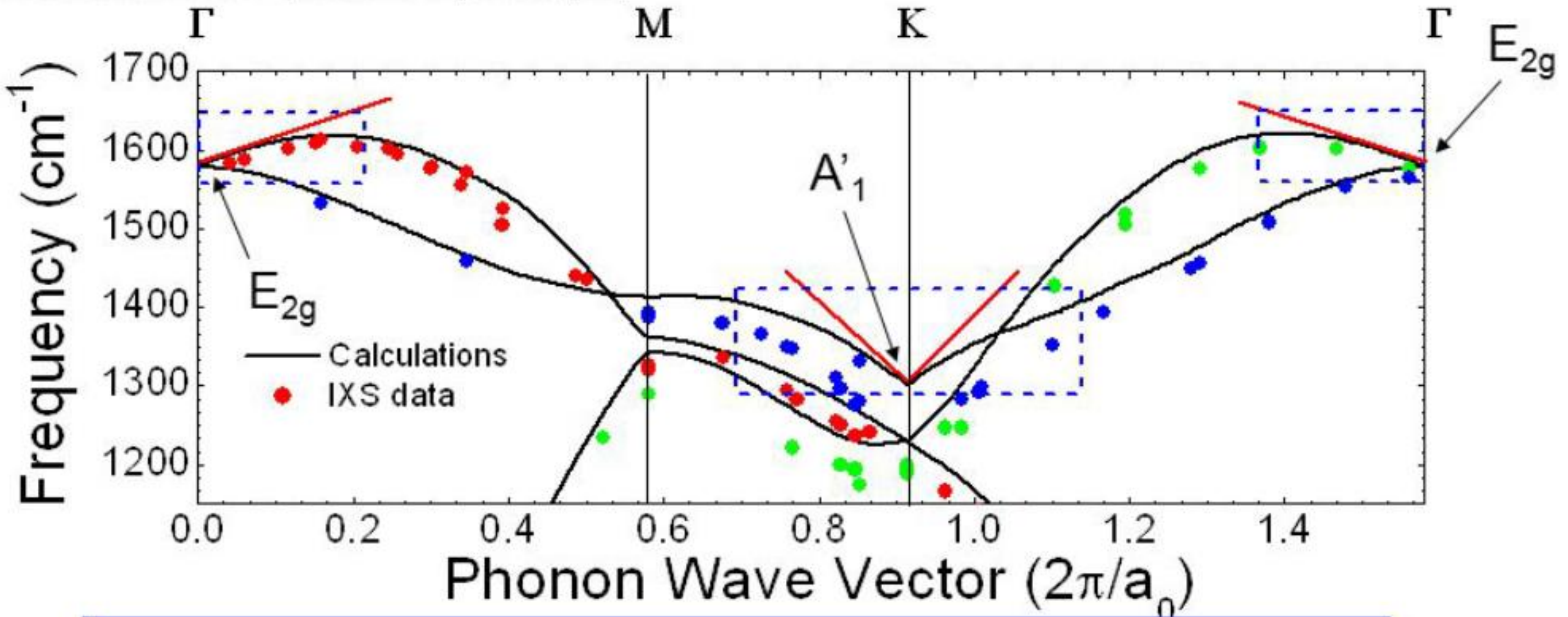


FIG. 1. Virtual excitations for $q < 2k_F$ and $q > 2k_F$.

Kohn anomalies in graphite

IXS data: J. Maultzsch *et al.* Phys. Rev. Lett. **92,** 075501 (2004)



- 2 sharp **kinks** for modes E_{2g} at Γ and A_1' at K

Kohn Anomaly ⟺ Electron-Phonon Coupling

UNIVERSITY OF CAMBRIDGE
CAPE

a) Escriviu les equacions del moviment.

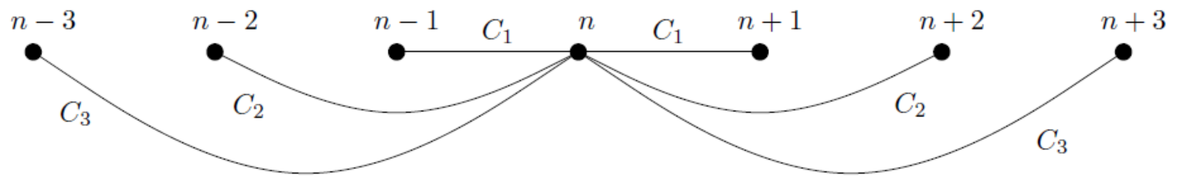


Figura IV.1: Esquema de les interaccions de la cadena d'àtoms.

Interaccions són ara amb tot els àtoms de la cadena, suma s'extén a infinit:

$$m\ddot{u}_n = \sum_{p=1}^{\infty} C_p \left[\underbrace{(u_{n-p} - u_n)}_{\text{Veïns a l'esq}} + \underbrace{(u_{n+p} - u_n)}_{\text{Veïns a la dr.}}\right] = \sum_{p=1}^{\infty} C_p \left[u_{n+p} + u_{n-p} - 2u_n\right]$$

Com que tots els àtoms són iguals, el mode col·lectiu serà amb la mateixa A per tots

$$u_n = A\exp\left[i\left(\vec{k}\cdot\vec{r}_n - \omega t\right)\right] \xrightarrow{1D} u_n = Ae^{i(kna-\omega t)}$$

$$\vec{r}_n = na\hat{x} \text{ i } \vec{k} = q\hat{x}$$

b) Trobeu la relació de dispersió, $\omega(q)$.

$$m\ddot{u}_n = \sum_{p=1}^{\infty} C_p \left[(u_{n-p} - u_n) + (u_{n+p} - u_n)\right] = \sum_{p=1}^{\infty} C_p \left[u_{n+p} + u_{n-p} - 2u_n\right]$$

$$u_n = Ae^{i(qna-\omega t)}$$

$$-m\omega^2 A e^{iqna} e^{-i\omega t} = \sum_{p=1}^{\infty} C_p \left[A e^{iq(n+p)a} e^{-i\omega t} + A e^{iq(n-p)a} e^{-i\omega t} - A e^{iqna} e^{-i\omega t}\right]$$

$$-m\omega^2 = \sum_{p=1}^{\infty} C_p \left[e^{ipqa} + e^{-ipqa} - 2\right] = \frac{2C}{a} \sum_{p=1}^{\infty} \frac{\sin\left(pq_0 a\right)}{p} (\cos(pqa) - 1)$$

$$\boxed{\omega = \left[\frac{2C}{ma} \sum_{p=1}^{\infty} \frac{\sin(pq_0 a)}{p} (1 - \cos(pqa))\right]^{1/2}}$$

c) Demostreu que aquest model presenta una anomalia de Kohn en forma de tangent vertical a $\omega(q)$ en $q = q_0$. [Suggeriment: treballeu amb $\omega^2(q)$.]

Volem veure que:

$$\left.\frac{\partial \omega}{\partial q}\right|_{q_0} \to \infty$$

Regla cadena:

$$\left.\frac{\partial\left(\omega^2\right)}{\partial q}\right|_{q_0} = 2\omega\left(q_0\right)\left.\frac{\partial \omega}{\partial q}\right|_{q_0} \quad (\#)$$

$$\omega = \left[\frac{2C}{ma}\sum_{p=1}^{\infty}\frac{\sin(pq_0a)}{p}(1-\cos(pqa))\right]^{1/2}$$

$$\frac{\partial\left(\omega^2\right)}{\partial q} = \frac{2C}{ma}\sum_{p=1}^{\infty}\frac{\sin\left(pq_0a\right)}{p}ap\sin(pqa)$$

En k_0 val:

$$\left.\frac{\partial\left(\omega^2\right)}{\partial q}\right|_{q_0} = \frac{2C}{m}\sum_{p=1}^{\infty}\sin^2\left(pq_0a\right) \to \infty$$

Ok !

Queda per veure que a l'expressió (#) de més a dalt, $\omega(q_0)$ té un valor finit….

c) Demostreu que aquest model presenta una anomalia de Kohn en forma de tangent vertical a $\omega(q)$ en $q = q_0$. [Suggeriment: treballeu amb $\omega^2(q)$.]

Volem veure que $\omega(k_0)$ és finit, això ens dirà que la derivada hi divergeix:

$$\omega^2(q_0) = \frac{2C}{ma}\sum_{p=1}^{\infty}\frac{\sin(pq_0a)}{p}\left(1-\cos(pq_0a)\right) = \frac{2C}{ma}\sum_{p=1}^{\infty}\left[\frac{\sin(pq_0a)}{p} - \frac{\sin(2pq_0a))}{2p}\right]$$

Termes amb p parell

Termes amb p senar

$$\omega^2(q_0) = \frac{2C}{ma}\sum_{p=1}^{\infty}\left[\frac{\sin(2pq_0a)}{2p} + \frac{\sin((2p-1)q_0a)}{(2p-1)} - \frac{\sin(2pq_0a))}{2p}\right]$$

$$= \frac{2C}{ma}\sum_{p=0}^{\infty}\frac{\sin((2p+1)q_0a)}{(2p+1)}$$

$$= \frac{2C}{ma}\frac{\pi}{4}$$

$$f(x) = \begin{cases} -1 & -\pi < x < 0 \\ 1 & 0 < x < \pi \end{cases} \rightarrow \mathrm{SF}[f(x)] = \frac{4}{\pi}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\sin((2n+1)x)}{2n+1}$$

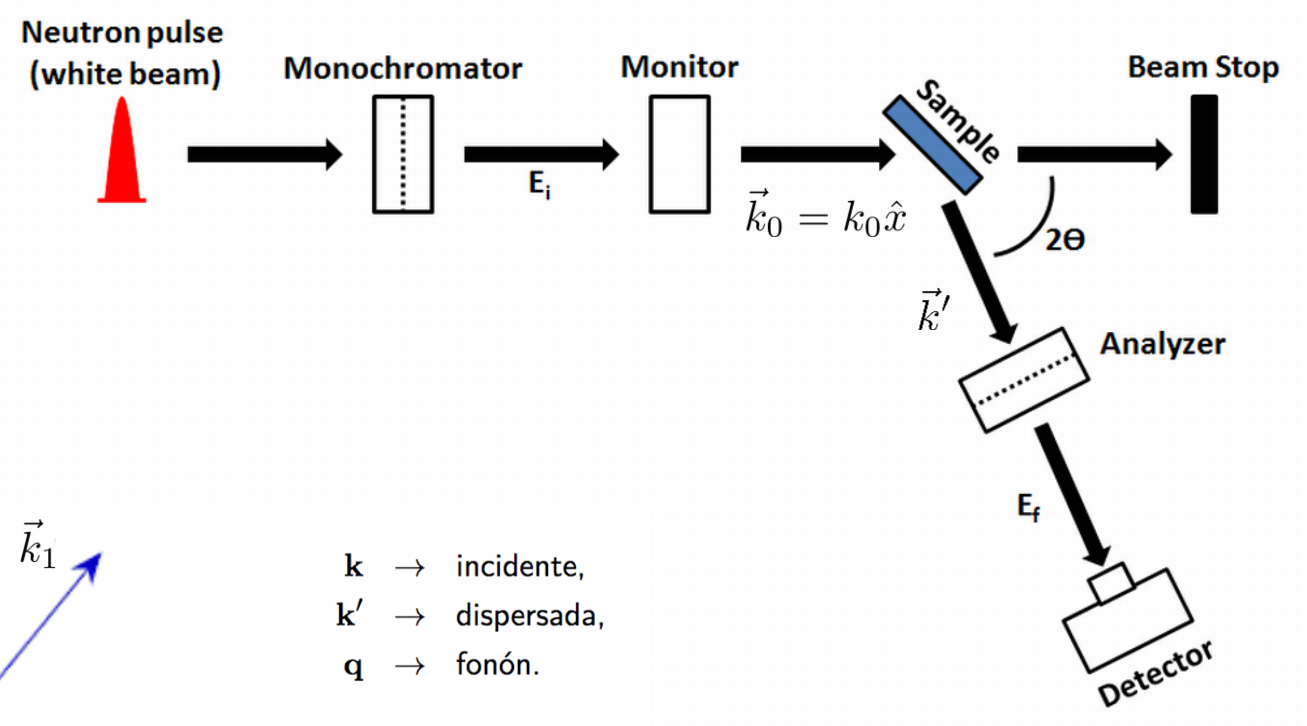
4.5. Un feix de neutrons, de longitud d'ona $\lambda_0 = 3'50$ Å, massa en repòs $M_n \approx 1'657 \times 10^{-27}$ kg i vector d'ona $\vec{k}_0 = k_0\hat{x}$ incideix sobre un sòlid d'estructura cristal·lina cúbica simple, de constant de xarxa $a = 4'25$ Å, i base monoatòmica. Alguns neutrons dispersats surten del sòlid seguint la direcció [111], amb una longitud d'ona $\lambda_1 = 2'33$ Å.

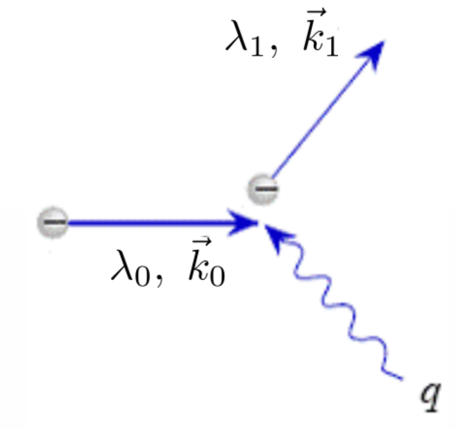
a) Es tracta d'un procés d'emissió o d'absorció d'un fonó?

b) Quina és l'energia i el vector d'ona del fonó implicat en el procés?

c) A partir d'aquests resultats, doneu un valor aproximat per a la velocitat del so.

➢ Problema 4.5, apartat a)





$\mathbf{k} \rightarrow$ incidente,
$\mathbf{k}' \rightarrow$ dispersada,
$\mathbf{q} \rightarrow$ fonón.

Absorción:
k′-q=k+G

Emisión:
k’+q=k+G

λ_0= 3.50 Å
λ_1= 2.33 Å ⇨ $\lambda_0 > \lambda_1$ ⇨ $k_0 < k_1$ ⇨ $E_0 < E_1$ ⇨ S’ha absorvit energia (fonó)

1) Calculem les energies del neutró incident i dispersat:

$$E_0 = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m_{\mathrm{N}}} = \frac{h^2}{2m_{\mathrm{N}}\lambda_0^2}$$

$$E_1 = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_{\mathrm{N}}} = \frac{h^2}{2m_{\mathrm{N}}\lambda_1^2}$$

En conservar-se l'energia, la diferència serà l'energia del fonó: $E_1 = E_0 + E_{fono}$

$$E_{\text{fonó}} = E_1 - E_0 = \frac{h^2}{2m_{\mathrm{N}}}\left(\frac{1}{\lambda_1^2} - \frac{1}{\lambda_0^2}\right) = \frac{h^2c^2}{2m_{\mathrm{N}}c^2}\left(\frac{1}{\lambda_1^2} - \frac{1}{\lambda_0^2}\right)$$

$$\approx \frac{(12400\, eV \cdot \mathring{A})^2}{2 \times 939\, MeV}\left(\frac{1}{2.33^2} - \frac{1}{3.5^2}\right) \approx 1.34410^{-21}\mathrm{J} = 8.388\, meV$$

$$\omega_{\text{fonó}} = E_{\text{fonó}}/\hbar = 1.27 \times 10^{13}\mathrm{Hz}$$

2) Calculem ara el vector d'ona del fonó:

$$\vec{k}_1 = \vec{k}_0 + \vec{q} + \vec{G} \qquad \vec{q} = (\vec{k}_1 - \vec{k}_0 - \vec{G})$$

Infinites comb. de q, G: imposem que q_i a 1ª Z.B.: $-\pi/a \leq q_i \leq \pi/a$

1 $\boxed{\vec{k}_1 \parallel [1,1,1]}$

$$\vec{k}_1 = \frac{2\pi}{\lambda_1}\frac{1}{\sqrt{3}}(\hat{x}+\hat{y}+\hat{z})$$

$$\vec{k}_0 = \frac{2\pi}{\lambda_0}\hat{x}$$

xarxa cub. simple $\vec{G} = \frac{2\pi}{a}(h\hat{x}+k\hat{y}+l\hat{z})$

$$\Rightarrow \begin{cases} \dfrac{2\pi}{\lambda_1\sqrt{3}} = \dfrac{2\pi}{\lambda_0} + q_x + \dfrac{2\pi}{a}h \\ \dfrac{2\pi}{\lambda_1\sqrt{3}} = q_y + \dfrac{2\pi}{a}k \\ \dfrac{2\pi}{\lambda_1\sqrt{3}} = q_z + \dfrac{2\pi}{a}l \end{cases} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \begin{aligned} q_x &= \frac{\pi}{a}\left(\frac{2}{\sqrt{3}}\frac{a}{\lambda_1} - \frac{2a}{\lambda_0} - 2h\right) \\ q_y &= \frac{\pi}{a}\left(\frac{2}{\sqrt{3}}\frac{a}{\lambda_1} - 2k\right) \\ q_z &= \frac{\pi}{a}\left(\frac{2}{\sqrt{3}}\frac{a}{\lambda_1} - 2l\right) \end{aligned}$$

subst. valors numèrics

$$\Rightarrow \begin{aligned} -1 &< 2(-0.161 - h) \leq +1 \\ -1 &< 2(1.053 - k) \leq +1 \end{aligned}$$

1ª Z.B.

$$-\frac{\pi}{a} < q_x, q_y, q_z \leq +\frac{\pi}{a}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} h = 0, k = l = 1 \\ q_x = -0.238\ \text{Å}^{-1} \\ q_y = q_z = 0.0785\ \text{Å}^{-1} \\ |\vec{q}_+| = 0.2639\ \text{Å}^{-1} \end{cases}$$

➢ Problema 4.5, apartat b

2 $\boxed{\vec{k}_1 \parallel -[1,1,1]}$

$$\vec{k}_1 = -\frac{2\pi}{\lambda_1}\frac{1}{\sqrt{3}}(\hat{x}+\hat{y}+\hat{z})$$
$$\vec{k}_0 = \frac{2\pi}{\lambda_0}\hat{x}$$
$$\vec{G} = \frac{2\pi}{a}(h\hat{x}+k\hat{y}+l\hat{z})$$

$\Rightarrow$

$$q_x = \frac{\pi}{a}\left(-\frac{2}{\sqrt{3}}\frac{a}{\lambda_1} - \frac{2a}{\lambda_0} - 2h\right)$$
$$q_y = \frac{\pi}{a}\left(-\frac{2}{\sqrt{3}}\frac{a}{\lambda_1} - 2k\right)$$
$$q_z = \frac{\pi}{a}\left(-\frac{2}{\sqrt{3}}\frac{a}{\lambda_1} - 2l\right)$$

$\Rightarrow$

$$-1 < 2(-2.267-h) \le +1$$
$$-1 < 2(-1.053-k) \le +1$$

$$\Rightarrow \begin{cases} h=-2, k=l=-1 \\ q_x = -0.267\ \mathring{A}^{-1} \\ q_y = q_z = -0.053\ \mathring{A}^{-1} \\ |\vec{q}_-| = 0.410\ \mathring{A}^{-1} \end{cases}$$

Aproximem la velocitat del so com: $v_{\rm so} \approx \frac{\omega}{|\vec{q}|}$

Pels dos casos tindrem:: $v_{\rm so+} \approx \frac{\omega}{|\vec{q}_+|} \approx 4862,6\,{\rm ms}^{-1}$

$$v_{\rm so-} \approx \frac{\omega}{|\vec{q}_-|} \approx 3107.7\,{\rm ms}^{-1}$$

On hem substuit la ω corresponent a l'energia del fonó de l'apartat a):

$$\omega = \frac{E}{\hbar} = 1.27 \times 10^{13}\ {\rm Hz}$$

4.6. L'argó cristal·litza a baixa temperatura en una estructura fcc de constant de xarxa $a = 5'21$ Å. S'estudia una mostra policristal·lina d'argó mitjançant dos experiments de dispersió de neutrons amb longitud d'ona $\lambda_0 = 1'81$ Å segons la següent geometria ($i = 1, 2$):

a) En un primer experiment s'analitzen els neutrons dispersats amb la mateixa energia que el feix incident ($\lambda_1 = 1'81$ Å) i s'observa un pic quan l'angle entre el dos feixos, $2\theta_1$, és $35'0°$.

i) Quin procés físic ha experimentat el feix de neutrons incident?

ii) Quina és la família de plans responsable d'aquest procés? Quin és el vector de la xarxa recíproca, $\vec{G}$, associat a aquesta família de plans?

b) Si ara, en un segon experiment fent servir la mateix energia del feix incident, s'analitza el feix de neutrons dispersats corresponents a una longitud d'ona $\lambda_2 = 1'80$ Å, s'observa un màxim d'intensitat en el detector quan l'angle entre els dos feixos, $2\theta_2$, és $34'5°$.

i) Quin procés físic ha experimentat ara el feix de neutrons incident? S'ha absorbit (destruït) o s'ha emés (creat) un fonó?

ii) Si la massa dels neutrons en repòs és $M_n \approx 1'657 \times 10^{-27}$ kg i la constant de Planck reduïda és $\hbar \approx 1'055 \times 10^{-34}$ J·s, quina és l'energia del fonó?

iii) Quin és el mòdul del vector d'ona $\vec{q}$ del fonó implicat si suposem que el vector de la xarxa recíproca, $\vec{G}$, és el mateix que al primer experiment?

iv) Estima la velocitat del so en l'argó.

➢ Problema 4.6, apartat a)

1) Energia neutró incident = Energia neutró dispersat (E_0= E_1)

Procés de **dispersió ELÀSTICA**

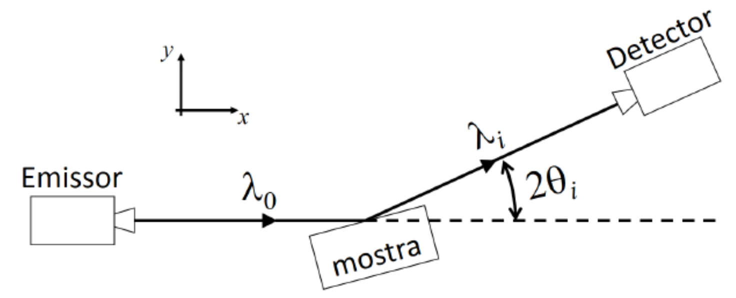


Figura 6: Geometria experimental del problema 4.6.

2) Recordem la llei de Bragg:

$$2d\sin\theta_1 = \lambda_0$$

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}} = \frac{a}{\sqrt{N}}$$

$$\frac{2a}{\sqrt{N}}\sin\theta_1 = \lambda_0$$

$$N = \left(\frac{2a}{\lambda_0}\sin\theta_1\right)^2$$

$$N = \left(\frac{2\times 5.21}{1.81}\sin(17.5^\circ)\right)^2 = 2.9968 \approx 3$$

N= 3 correspon a h= k= l= 1
Família de **plans [1,1,1]**
(1ª que no presenta extin. a fcc)

1) En el segon procés, la longitud d'ona del neutró canvia en dispersar-se:

Procés de ***dispersió INELÀSTICA***

$\lambda_0 = 1.81$ Å
$\lambda_2 = 1.80$ Å $\Rightarrow \lambda_0 > \lambda_2 \Rightarrow k_0 < k_2 \Rightarrow E_0 < E_2 \Rightarrow$ S'ha absorvit energia (fonó)

2) Recordem la llei de Bragg:

En conservar-se l'energia, la diferència serà l'energia del fonó ***absorvit*** de la xarxa:

$$E_{\text{fonó}} = E_2 - E_0 = \frac{h^2}{2m_{\mathrm{N}}}\left(\frac{1}{\lambda_2^2} - \frac{1}{\lambda_0^2}\right) = \frac{h^2c^2}{2m_{\mathrm{N}}c^2}\left(\frac{1}{\lambda_2^2} - \frac{1}{\lambda_0^2}\right)$$
$$\approx \frac{(12400\, eV\cdot \text{Å})^2}{2\times 939\, MeV}\left(\frac{1}{1.80^2} - \frac{1}{1.81^2}\right) = 0.2777\, meV$$

3) Calculem ara el vector d'ona del fonó. Conservació del moment:

$$\vec{k}_2 = \vec{k}_0 + \vec{q} + \vec{G}$$

Ara, diferència del P4.5., coneixem G: $\vec{G} = \frac{2\pi}{a}(1,1,1)$

I de l'apartat a) tenim també que es conserva el moment: $\vec{k}_1 = \vec{k}_0 + \vec{G}$

$$\Rightarrow \vec{k}_2 = \vec{k}_1 + \vec{q} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \vec{q} = \vec{k}_2 - \vec{k}_1 = \frac{2\pi}{\lambda_2}(\cos\theta_2, \sin\theta_2) - \frac{2\pi}{\lambda_1}(\cos\theta_1, \sin\theta_1)$$

$$\boxed{|\vec{q}| = 0.086\mathrm{A}^{-1}}$$

4) Calculem finalment la velocitat del so:

$$\boxed{v_{\mathrm{so}} \approx \frac{\omega}{|\vec{q}|} \approx 1172\,\mathrm{ms}^{-1}}$$