Física de la materia condensada

20210831

Física "Cristalografía" fenomenología	Matemática "Álgebra Lineal" estructura

✓ estructura cristalina $\longleftrightarrow$ ✓ espacio vectorial $\bar{v}$

$\updownarrow$

Red de Bravais

$\updownarrow$ espacio real

✓ red recíproca $\longleftrightarrow$ ✓ espacio dual $\bar{v}^*$

$\downarrow$

producto interno

$e^{i\bar{k}\cdot\bar{r}}$ ← onda plana

$$e^{i\bar{k}\cdot(\bar{r}+\bar{R})} = e^{i\bar{k}\cdot\bar{r}} \longleftrightarrow \boxed{(\bar{v}^*,\bar{v}) \geq 0}$$

$$\boxed{e^{i\bar{k}\cdot\bar{R}} = 1}$$

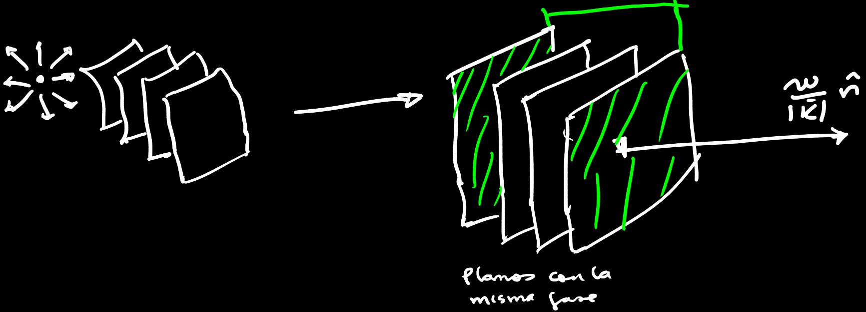
✓ el espacio dual es un espacio vectorial

Repaso de ondas planas : onda → perturbación

- Una onda plana es una onda con frentes paralelos, de amplitud constante y normales al vector de velocidad de fase

- Una onda se describe de esta forma
$$u(\bar{x},t) = a\, e^{i(\bar{k}\cdot\bar{x} - \omega t)},$$
donde $\bar{k}$ es el vector de onda y ω es la frecuencia angular

- La onda tiene una velocidad de fase dada por
$$\frac{\omega}{|\bar{k}|},$$
y tiene una velocidad de grupo dada por
$$\frac{d\omega}{d|\bar{k}|}$$



Red recíproca

- ✓ Consideremos una red de Bravais y un conjunto de ondas planas con la misma periodicidad de la red.
- ✓ El conjunto de todos los vectores de onda, $\vec{K}$, que producen ondas planas con la misma periodicidad de una red de Bravais es una red recíproca.

V: $\bar{v}$, $\bar{w}$, $\bar{x}$, $\bar{y}$

V^*: $\bar{v}^*$, $\bar{w}^*$, $\bar{x}^*$, $\bar{y}^*$ $\Longrightarrow (\bar{x}^*, \bar{x})$

Red de Bravais: $\bar{b}_1$, $\bar{b}_2$, $\bar{b}_3$ $\longleftrightarrow$ Red recíproca: $\bar{k}_1$, $\bar{k}_2$, $\bar{k}_3$

minúsculas

mayúscula

$$\bar{K} = \delta \bar{k}_1 + \varepsilon \bar{k}_2 + \chi \bar{k}_3$$

$$\bar{R} = \alpha \bar{b}_1 + \beta \bar{b}_2 + \gamma \bar{b}_3$$

$\cancel{(\bar{v}^*, \bar{v})}$ Cristalografía $\bar{K} \cdot \bar{R}$ satisfaga

$$e^{i\bar{K}\cdot\bar{R}} = 1$$

✓ La red recíproca también es una red de Bravais

→ Ejemplo: Considere que $\hat{a}_1, \hat{a}_2, \hat{a}_3$ son vectores primitivos de una Red de Bravais. ¿Cómo calculamos la base de los vectores de la red recíproca?

* Nota: cambio de notación

$k_i \to$ escalar

Red de Bravais

$$\bar{R} = n_1\hat{a}_1 + n_2\hat{a}_2 + n_3\hat{a}_3$$

Red Recíproca

$$\bar{K} = k_1\hat{b}_1 + k_2\hat{b}_2 + k_3\hat{b}_3$$

$$\bar{K}\cdot\bar{R} = k_1n_1 + k_2n_2 + k_3n_3$$

$$e^{i\bar{K}\cdot\bar{R}} = 1 \quad \longrightarrow \quad \boxed{\bar{K}\cdot\bar{R} = 2\pi m} \quad m: \text{entero}$$

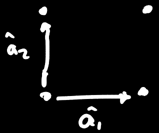
vamos a imponer la condición $\hat{b}_i \cdot \hat{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$.

ahora, si usamos

$$\hat{b}_1 = 2\pi \frac{\hat{a}_2 \times \hat{a}_3}{\hat{a}_1\cdot(\hat{a}_2\times\hat{a}_3)} \; ; \; \hat{b}_2 = 2\pi \frac{\hat{a}_3 \times \hat{a}_1}{\hat{a}_1\cdot(\hat{a}_2\times\hat{a}_3)} \; ; \; \hat{b}_3 = 2\pi \frac{\hat{a}_1 \times \hat{a}_2}{\hat{a}_1\cdot(\hat{a}_2\times\hat{a}_3)}$$

Podemos construir la red recíproca

→ Si una red recíproca es una red de Bravais, ¿qué es el recíproco de la red recíproca?



$\longrightarrow$ red recíproca

$\hat{b}_1 =$

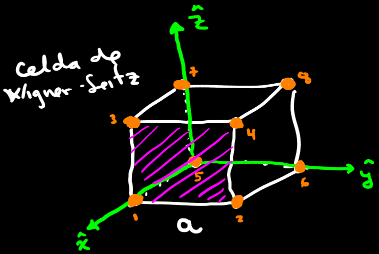
$\hat{b}_2 =$

$\{\hat{a}_1, \hat{a}_2\}$: red de Bravais $\rightleftarrows$ $\{\hat{b}_1, \hat{b}_2\}$: red de Bravais

→ La celda de Delone que se forma en la red de Bravais (en espacio real) se llama celda de Wigner-Seitz.

→ La celda de Voronoi que se forma en la red recíproca se llama "Primera Zona de Brillouin".

Ejemplo: Calcular la red recíproca de una red cúbica simple (sc)



$$\hat{a}_1 = a\hat{x}$$
$$\hat{a}_2 = a\hat{y}$$
$$\hat{a}_3 = a\hat{z}$$

1: [a 0 0] 5: [0 0 0]
2: [a a 0] 6: [0 a 0]
3: [a 0 a] 7: [0 0 a]
4: [a a a] 8: [0 a a]

$a \to 1/a$
$\infty \to 0$ (1 0 0)
$\infty \to 0$

Volumen de la celda

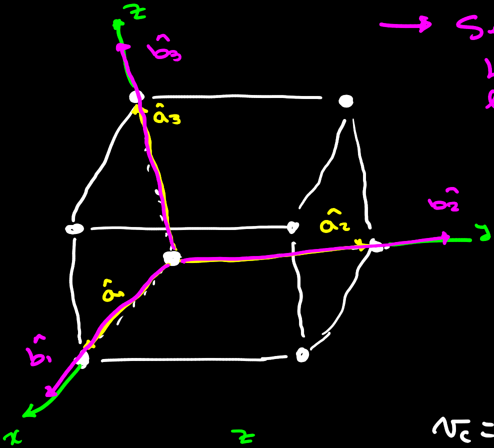
$$V_c = \hat{a}_1 \cdot (\hat{a}_2 \times \hat{a}_3) = a\hat{x} \cdot (a\hat{y} \times a\hat{z})$$
$$= a\hat{x} \cdot (a^2 \hat{x})$$
$$\boxed{V_c = a^3}$$

vectores primitivos de la red recíproca

$$\hat{b}_1 = 2\pi \frac{\hat{a}_2 \times \hat{a}_3}{V_c} = \frac{2\pi}{a^3}(a\hat{y} \times a\hat{z}) = \frac{2\pi a^2}{a^3}\hat{x} = \frac{2\pi}{a}\hat{x}$$

$$\hat{b}_2 = 2\pi \frac{\hat{a}_3 \times \hat{a}_1}{V_c} = \frac{2\pi}{a^3}(a\hat{z} \times a\hat{x}) = \frac{2\pi a^2}{a^3}\hat{y} = \frac{2\pi}{a}\hat{y}$$

$$\hat{b}_3 = \frac{2\pi}{a}\hat{z}$$



→ Si $a < 2\pi$

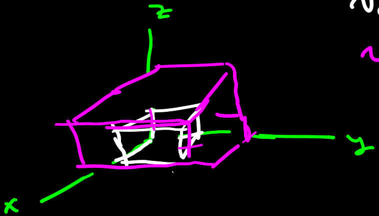
Los planos normales a los vectores

$\pm \hat{b}_1$

$\pm \hat{b}_2$

$\pm \hat{b}_3$

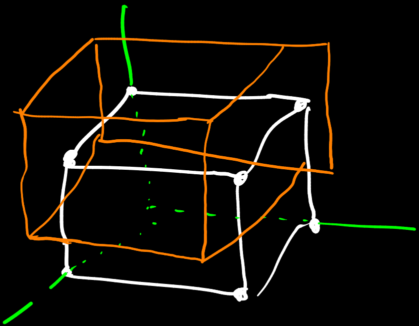
forman la primera zona de Brillouin



$v_c = a^3$

$v = \left(\frac{2\pi}{a}\right)^3$

Si $a > 2\pi$



La celda cerrada por los planos normales a $\pm\hat{b}_1$, $\pm\hat{b}_2$, $\pm\hat{b}_3$