

Estado Solido

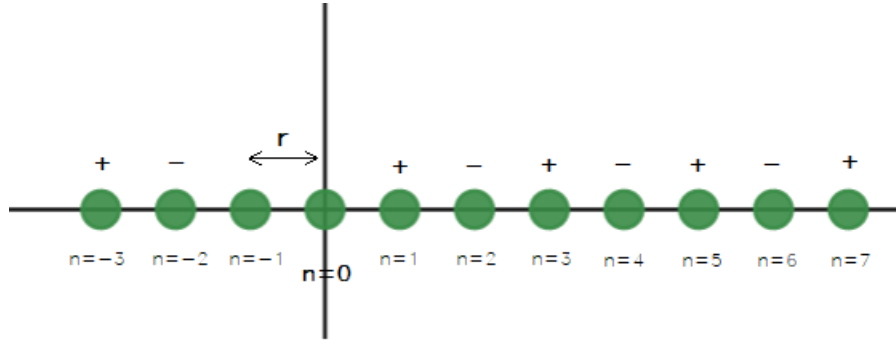
Cuestionario II

Marco Antonio Rodríguez de León [1941556]

1.- Explicar en detalle qué es la constante de Madelung (en qué casos se aplica, qué representa, cómo se obtiene, etc)

Sea un sólido con átomos en un arreglo iónico, con carga q , y cuyas partículas son equidistantes con una distancia r . Entonces, la energía potencial con respecto a una partícula i , está dada por:

$$U_i(r) = -\frac{\alpha q^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{A J_b}{r^b}$$



Donde, α es conocida como *constante de Madelung*. Para un arreglo unidimensional:

$$\alpha = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n} = \ln(4)$$

Para un arreglo tridimensional, se tiene:

$$\alpha = \sum_{j \neq i} \frac{1}{x_{i,j}} = \sum_{j \neq i} \frac{r_{i,j}}{r}$$

Donde $x_{i,j}$ es el factor de proporcionalidad entre la distancia de las partículas i y j , y la distancia entre cualesquiera dos partículas vecinas. Dicha constante guarda la información de cuán grande son las contribuciones de todos los vecinos de la partícula i -ésima, dadas sus distancias y signos de las cargas.

2.- Explicar qué es (a) la velocidad de fase (b) la velocidad de grupo (c) el fenómeno de dispersión (d) enunciar ejemplos de medios dispersivos

a) Sea un sistema oscilante con número de onda: k , y frecuencia angular: ω . Se define de forma matemática la velocidad de fase como la proporción de frecuencia angular con respecto al número de onda:

$$v_p := \frac{\omega}{k}$$

Esto indica, la tasa a la cual la fase de una onda se propaga en el espacio. La velocidad de fase también expresa la velocidad de propagación de una onda dada su amplitud:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{1}{v_p^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}$$

Para las ondas planas, se tiene que la velocidad de un punto en la onda (x) es la velocidad de fase:

$$v_p = \frac{dx}{dt}.$$

b) Sea un sistema oscilante con numero de onda: k , y frecuencia angular: ω . La definición formal de la velocidad de grupo de una onda, esta dada por la variación de la frecuencia angular con respecto a la variación del numero de onda:

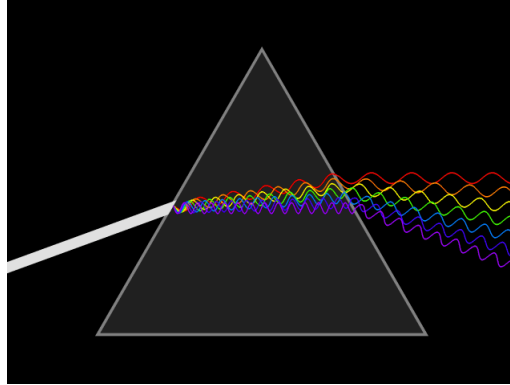
$$v_g := \frac{\partial \omega}{\partial k}$$

Esto indica, la tasa a la cual dos fases de una onda se propaga en cualquier parte del espacio. Para las ondas envolventes, a diferencia de las ondas planas, se tiene que la velocidad de un punto en la onda (x) es la velocidad de grupo: $v_g = \frac{dx}{dt}$.

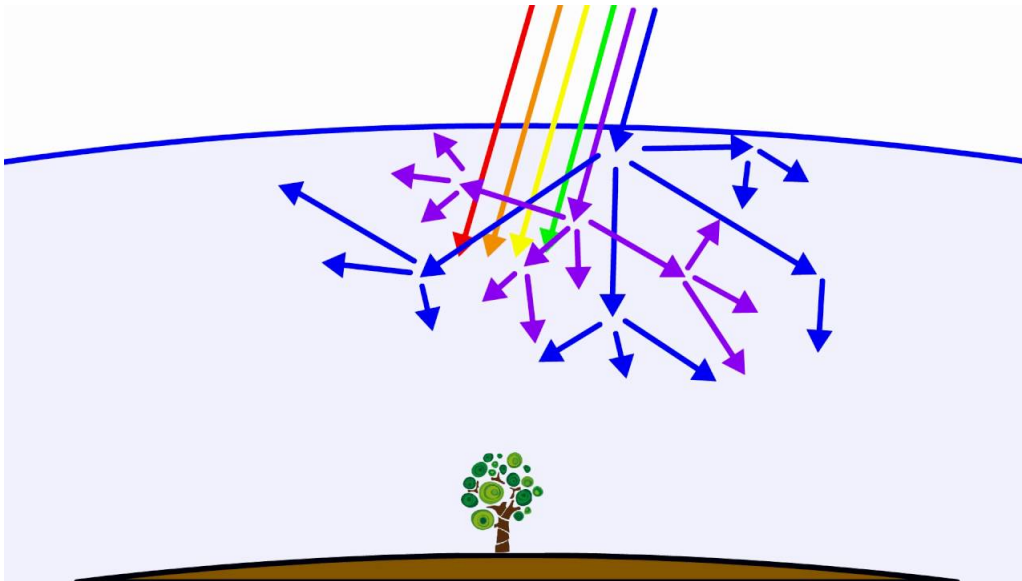
Vease que, si: $\omega = v_p k$, con: v_p constante con respecto al numero de onda. Entonces: $v_g = v_p$. Esto es, si la onda en cualquier parte del espacio mantiene su relación frecuencia angular-numero de onda.

c) Sea un sistema oscilante de los atomos en un cristal, con amplitud: $u_n = Ae^{i(kx-\omega t)}$. Si se toman unicamente valores reales del numero de onda ($Re(k) = k$), entonces el sistema se comporta con un oscilador armonico simple, el cual tiene un limite de amplitud-energía: frecuencia de corte ($|\omega| \leq \omega_m$). No obstante, al tomar valores complejos del numero de onda ($k = k_r + ik_i$; $k_r, k_i \in \mathbb{R}$), se logrará tener frecuencias mayores a la frecuencia de corte. Sin embargo, haciendo dicha consideración, resulta en una atenuación en la amplitud de la onda, conocido como: fenomeno de dispersión, de la forma: $e^{-k_i \omega t}$. Esto depende directamente del medio, en donde la estructura cristalina que conforman, la separación y las propiedades estructurales y atomicas, determinan dicha atenuación.

d) El ejemplo mas conocido de medios dispersivos, es el generado por un prisma cuando los haces de luz pasan a través de él. La geometria del material modifica el angulo del rayo, y la composición molecular del prisma dispersa la luz descomponiendola en sus componentes dependiendo de su longitud de onda.



Otro ejemplo de medios dispersivos es el ocasionado por los gases y fluidos, dado el fenómeno conocido como: *Rayleigh scattering* o *dispersión de Rayleigh*. Este fenómeno está dado por la longitud de onda de la luz, el índice de refracción, el ángulo de incidencia en el material y la intensidad de la luz que llega. Un ejemplo de esta dispersión es la ocasionada por la atmósfera de un planeta, y la dispersión de los rayos de luz de estrellas lejanas al atravesar cuerpos gaseosos.

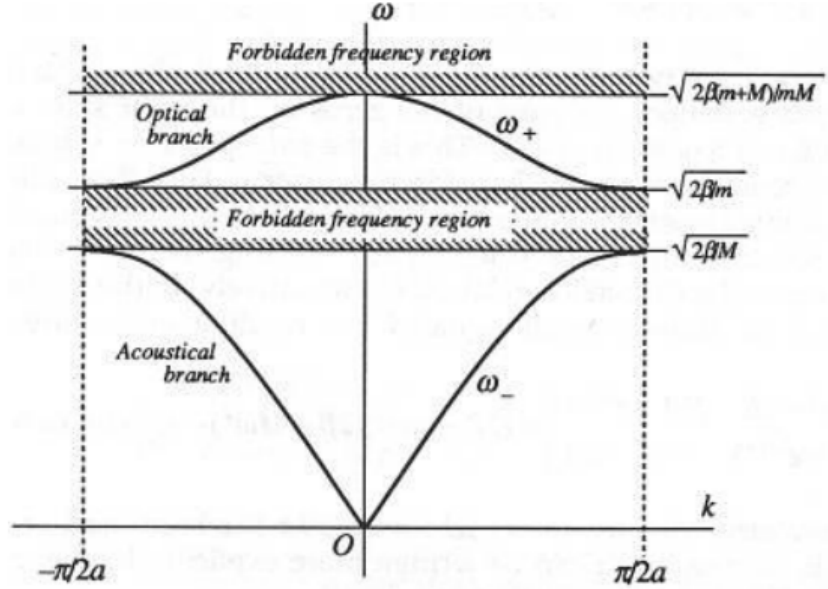


3.- ¿Qué son los modos normales de vibración?, ¿en qué contexto se definen y se aplican?

Sea un sistema oscilante acoplado, con n masas (m_i), constantes de restitución (k_i), y frecuencias de oscilación (ω_i). Existe una gran variedad de formas en las que el sistema puede oscilar, dada la frecuencia de oscilación de cada masa acoplada, y las fases. Al caso donde todas las masas tienen la misma frecuencia de oscilación y una diferencia de fase constante, se le conoce como: modo normal de oscilación.

En las redes cristalinas, los modos normales están determinados por las zonas de Brillouin.

4.- ¿Cómo se genera la curva de dispersión que da lugar a la aparición de modos acústicos y modos ópticos? (en esta caso implica las respectivas frecuencias de corte y atenuación de la onda. Incluir estos efectos en la explicación)



Partiendo de la frecuencia angular de un sistema iónico:

$$\omega = \omega_m \sin(ka/2)$$

De aquí, se observa que, para valores reales de k ($k \in \mathbb{R}$), la frecuencia está acotada por la frecuencia de corte: $|\omega| \leq \omega_m$. A esto se le conoce como: *banda acústica*. No obstante, la frecuencia puede tomar valores mayores a la frecuencia de corte. Para ello, se toman valores complejos del número de propagación ($k \in \mathbb{C}$), conocido como: *banda óptica*. Para obtener los valores del límite acústico, los límites ópticos y las regiones prohibidas, se requiere considerar una red diatómica real. La frecuencia angular de la red, está dada por:

$$\omega_{-,+} = \sqrt{\frac{\beta(m+M)}{mM}} \sqrt{1 \pm \sqrt{1 - \frac{4mM \sin^2(ka)}{(m+M)^2}}}$$

Con ω_- el límite inferior y ω_+ el límite superior. Para el límite acústico, se toma: $k = 0$, por lo que se tiene $\omega \in [\omega_-(0), \omega_+(0)]$:

$$\omega_-(0) = 0 \quad \wedge \quad \omega_+(0) = \sqrt{\frac{2\beta}{M}}$$

Por otro lado, para el límite óptico, se toma: $k = \pi/a$, el correspondiente a la primera franja de la longitud de onda: $\lambda = 2a$. Entonces, se obtiene como límite acústico $\omega \in [\omega_-(\pi/a), \omega_+(\pi/a)]$:

$$\omega_-(\pi/a) = \sqrt{\frac{2\beta}{m}} \quad \wedge \quad \omega_+(\pi/a) = \sqrt{\frac{2\beta(m+M)}{mM}}$$

5.- Explicar en qué consiste el efecto *Reststrahlen*

El efecto *Reststrahlen* o *rayos residuales*, es un fenómeno óptico-reflectante, en donde la radiación electromagnética tiene dificultades de propagarse a través de un medio, dado su índice de refracción. La banda de energía en donde sucede el cambio del índice de refracción, con la banda de absorban-
cia, se conoce como *banda reststrahlen*. Dado la dificultad de propagación de los rayos incidentes, se presenta un alto grado de reflexión del material.

6.- ¿Qué son los fonones de la red?

Los fonones son cuasipartículas (partículas únicas que se mueven rodeadas de nubes de partículas arrastradas en un medio), que representan los modos vibratorios en el interior de una estructura cristalina. Mismas que pueden ser creadas y/o destruidas por colisiones. Estas cuasipartículas, al ser sumamente pequeñas, están fuertemente sujetas al principio de incertidumbre de Heisenberg. Donde su momento está bien definido, pero su posición no.

Los fonones son similares a los modos vibracionales de la mecánica clásica, en la mecánica cuántica. Siendo estos, oscilantes bajo la misma frecuencia de vibración, y misma diferencia de fase.

