Problemas Estado Sólido

Abel Doñate Muñoz

Contents

1 Estructura cristalina

2 Dinámica de los cristales

1 Consideramos un cristal iónico unidimensional infinito, construido por una sucesión de átomos con masa m y carga $+q$ y $-q$ alternativamente. El potencial interatómico es $V_i(r_i) = \frac{A}{|r_i - r_{i-1}|^n} + \frac{A}{|r_{i+1} - r_i|^n} + \sum_{i \neq j} \varepsilon \frac{q_i q_j}{|r_i - r_j|}$. El parámetro de red a corresponde a la posición de equilibrio en $T = 0$.

a) Calculad el valor de la constante A en función del parámetru de red y demostrad que la energía de enlace es $E_0 = \frac{\varepsilon q^2 \ln 2}{a}(1 - \frac{1}{n})$

b) Calculad la compresibilidad del cristal y la velocidad del sonido.

a) (dibujito) Sea r la distancia entre átomos cuando $T = 0$. Entonces

$$U_T = \frac{1}{2}(2N\frac{2A}{r^n} + \sum_{j=1}^{2N}\sum_{l \neq 0}(-1)^l \varepsilon \frac{q^2}{|l|r}) = \frac{2NA}{r^n} - \frac{2Nq^2\varepsilon \ln 2}{r}$$

Si diferenciamos con respecto a r e igualamos a cero encontramos la posición de equilibrio

$$0 = \frac{dU_T}{dr} = -\frac{2NAn}{a^{n+1}} + \frac{2nq^2 \ln 2\varepsilon}{a^2} \quad \Rightarrow \quad \boxed{A = \frac{a^{n-1}\varepsilon \ln 2q^2}{n}}$$

Y la energía por enlace es simplemente sustituyendo $\boxed{E_0 = -\frac{U_T}{2N} = \left(1 - \frac{1}{n}\right)\frac{\varepsilon q^2 \ln 2}{a}}$

b) (falta)

2 Calculad la relación de dispersión para una cadena unidimensional de átomos de masa m conectadas por un muelle de constante k_1 para los primeros vecinos y k_2 para los segundos

(dibujito)

Sea x_n la posición respecto a la posición de equilibrio $r_n = an$. Entonces las ecuaciones del movimiento son

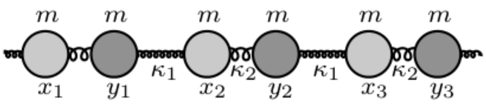
$$F = m\ddot{x}_n = k_1(x_{n+1} + x_{n-1} - 2x_n) + k_2(x_{n+2} + x_{n-2} - 2x_n)$$

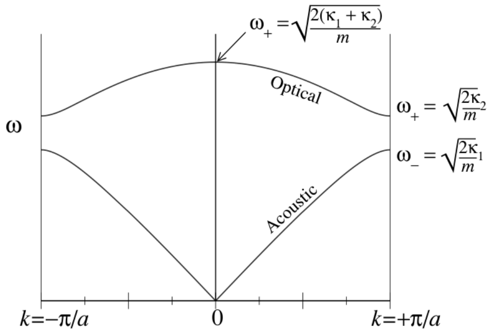
Suponiendo que se comporta como un oscilador armónico hacemos el siguiente ansatz: $x_n = Ae^{i(kna - \omega t)}$. Vemos ahora que deben cumplir la ω y la k.

$$-m\omega^2 Ae^{i(kna-\omega t)} = k_1 Ae^{i(nka-\omega t)}\left(e^{ika} + e^{-ika} - 2\right) + k_2(e^{2ika} + e^{-2ika} - 2)$$
$$m\omega^2 = 4k_1\left(\frac{\cos(ka) - 1}{2}\right) + 4k_2\left(\frac{\cos(2ka) - 1}{2}\right) = 4k_1 \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right) + 4k_2 \sin^2(ka)$$

Por tanto llegamos a la ecuación de dispersión $\boxed{\omega(k) = \sqrt{\frac{4}{m}\left(k_1 \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right) + k_2 \sin^2(ka)\right)}}$

3 Calculad la relación de dispersión para una cadena unidimensional de átomos de masa m conectados con los primeros vecinos por muelles de constantes k_1 y k_2 alternativamente.





Procedemos de manera parecida al ejercicio anterior, pero apreciamos algunos cambios. En primer lugar las amplitudes serán diferentes según el tipo de partícula (par o impar). Las posiciones de equilibrio ya no son equiespaciadas, sino que hay 2 distancias (la del muelle k_1 y la del k_2). Llamaremos x_n e y_n a las variaciones con respecto al equilibrio respectivamente. Si planteamos el diagrama de fuerzas tenemos

$$m\ddot{x}_n = k_1(y_{n-1} - x_n) + k_2(y_n - x_n), \quad m\ddot{y}_n = k_1(x_{n+1} - y_n) + k_2(x_n - y_n)$$

Con todo esto podemos hacer nuestro ansatz como:

$$x_n = Ae^{i(kna-\omega t)} \qquad y_n = Be^{i(kna-\omega t)}$$

y obtenemos las ecuaciones

$$-m\omega^2 A = -A(k_1+k_2) + B(k_1 e^{ika} + k_2), \quad -m\omega^2 B = -A(k_1 e^{ika} + k_2) + B(-k_1 - k_2)$$

Que puede ser escrito en forma matricial como

$$m\omega^2 \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (k_1+k_2) & -k_2 - k_1 e^{ika} \\ -k_2 - k_1 e^{ika} & (k_1+k_2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = K \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$$

Con lo que $m\omega$ ha de ser valor propio de la matriz K. Imponiendo esta condición tenemos que

$$0 = \det(K - m\omega^2 I) = |(k_1+k_2) - m\omega^2|^2 - |k_2 + k_1 e^{ika}|^2$$

cuyas raíces son $m\omega^2 = (k_1+k_2) \pm |k_1 + k_2 e^{ika}|$. Simplificando el segundo término llegamos a la ecuación de dispersión

$$\boxed{\omega_\pm(k) = \sqrt{\frac{k_1+k_2}{m} \pm \frac{1}{m}\sqrt{(k_1+k_2)^2 - 4k_1k_2\sin^2(ka/2)}}}$$

Cada rama del dibujo corresponde a un signo de la solución de la ecuación de dispersión. El negativo corresponde a la acústica y el positivo a la óptica.