Física del Estado Sólido - Tema 3 Ejercicio 7

Lucas Pérez Romero

November 2024

Enunciado

La relación de dispersión de una cadena monoatómica de longitud L de N átomos de masa M puede aproximarse como:

$$\omega^2(k) = \frac{2}{M}[C(1 - cos(ka)) + C'(1 - cos(2ka))]$$

Donde a es el parámetro de red y C y C' las constantes de acoplamiento entre primeros y segundos vecinos, respectivamente.

a) Determina la velocidad de grupo de las ondas elásticas en la cadena.

b) Calcula la velocidad de propagación del sonido en la cadena (es decir, el valor de v_s tal que $\omega(k) \approx v_s k$ en el centro de la zona de Brillouin).

c) Determina la densidad de estados de la cadena.

d) Evalúa qué restricción impone el resultado anterior sobre los posibles valores de C y C' ¿Qué significado físico tiene esta restricción?

Velocidad de grupo

La velocidad de grupo de las ondas de la cadena monoatómica se calcula mediante:

$$v_g = |\vec{\nabla}_k \omega| = \frac{d\omega}{dk}$$

La expresión de ω en base a la relación de dispersión del enunciado es:

$$\omega(k) = \sqrt{\frac{2}{M}[C(1 - cos(ka)) + C'(1 - cos(2ka))]}$$

Por tanto la velocidad de grupo v_g es:

$$v_g = \frac{1}{2}\frac{2}{M}\frac{aCsin(ka) + 2C'sin(2ka)}{\sqrt{\frac{2}{M}[C(1 - cos(ka)) + C'(1 - cos(2ka))]}}$$

$$v_g = \frac{a(Csin(ka) + 2C'sin(2ka))}{M\omega}$$

Velocidad Propagación

Para obtener la velocidad de propagación hay que aproximar la relación de dispersión al centro de la primera zona de Brillouin, es decir cuando $k \to 0$. Al hacer la aproximación anterior la relación de dispersión del enunciado resulta en:

$$\omega^2(k) \approx \frac{2}{M}[C(1-(1-a^2\frac{k^2}{2})) + C'(1-(1-a^2 4\frac{k^2}{2}))] = \frac{2}{M}[\frac{C}{2} + 2C']a^2k^2$$

$$\omega = a\sqrt{\frac{2}{M}(\frac{C}{2} + 2C')}k = v_s k$$

Finalmente la velocidad de propagación equivale a:

$$v_s = a\sqrt{\frac{1}{M}(C + 4C')}$$

Densidad de Estados

La densidad de estados de una cadena monoatómica se calcula mediante:

$$D(\omega) = \frac{d\Gamma}{d\omega} = \frac{d\Gamma}{dk}\frac{dk}{d\omega}$$

donde $\frac{dk}{d\omega} = (\frac{d\omega}{dk})^{-1} = \frac{1}{v_g}$ y $\Gamma = \frac{kL}{\pi}$, por tanto la densidad de estados es:

$$D(\omega) = \frac{L}{\pi}\frac{M\omega}{a(Csin(ka) + 2C'sin(2ka))}$$

Como $L = Na$, donde N es el número de nodos en el cristal, se puede simplificar como:

$$D(\omega) = \frac{NM\omega}{\pi(Csin(ka) + 2C'sin(2ka))}$$

Restricciones sobre C y C'

El resultado anterior de la densidad de estados aunque no lo vea a simple vista posiblemente lleve a que C' no pueda ser C pues en algún momento los dos senos que dividen la expresión podrían anularse y llevar a una indeterminación. Esto siginificaría que la cadena estará siempre compuesta por dos átomos de diferente elemento, es decir es una cadena diatómica.