

Física del Estado Sólido - Tema 3 Ejercicio 7

Lucas Pérez Romero

November 2024

1 Enunciado

Se quiere analizar los modos de vibración de una estructura zinc-blenda en la dirección cristalográfica $[1\ 1\ 1]$.

a) Justifica que la dinámica de la red en esta dirección se puede asimilar a la de la cadena lineal diatómica formada por los átomos que se encuentran en la diagonal principal de la celda cúbica.

b) Calcula la distancia entre los distintos átomos de la cadena y formula el lagrangiano del sistema asumiendo que solo hay interacción entre átomos adyacentes en la cadena.

c) Calcula las ecuaciones del movimiento y las soluciones como combinaciones lineales de ondas planas.

d) Determina y representa la relación de dispersión.

e) Calcula la frecuencia de dispersión en el centro y en el borde de la primera zona de Brillouin para los distintos modos.

2 Diagonal principal de la celda cúbica como una cadena lineal diatómica

Para justificar que podemos asumir una cadena lineal diatómica en la dirección propuesta debemos primero analizar la estructura cristalina de la zinc-blenda o la esfalerita.

Observando el dibujo de la esfalerita podemos apreciar que su estructura es tipo diamante. Situando el sistema de coordenadas en la posición propuesta y viendo el vector que va en la dirección $(1,1,1)$, la dirección propuesta, nos encontramos con los átomos de la diagonal del cubo. Esta diagonal está compuesta por una cadena intercalada de los dos átomos de la estructura, de tal forma que solo interactúan entre primeros vecinos. Sabiendo que entre ellos la distancia es siempre la misma, $u_s = sa$, y asumiendo que los ángulos que se puedan formar en los enlaces no afectan a la vibración de los átomos es fácilmente asumible el modelo de una cadena lineal diatómica.

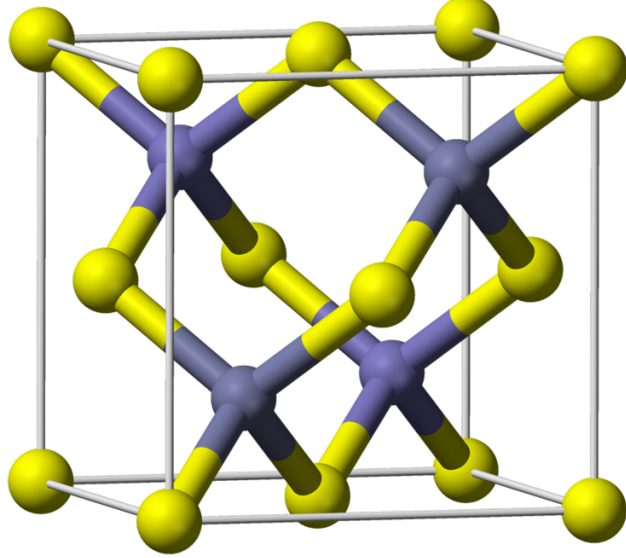


Figure 1: Estructura cristalina del zinc-blenda

3 Distancia interatómica y lagrangiano del sistema

De haber visto la estructura tipo diamante en clase podemos saber que la distancia entre el origen y el átomo que comienza la cadena es $\vec{d} = \frac{a}{4}(1, 1, 1)$ cuyo módulo es $|\vec{d}| = d = a\frac{\sqrt{3}}{4}$, de esta forma la distancia entre átomos vecinos es $u_s = sd = sa\frac{\sqrt{3}}{4}$ y la distancia entre átomos del mismo elemento es $v_s = u_s + |\vec{a}_2|$ siendo \vec{a}_2 uno de los vectores primitivos de la red de Bravais en concreto $\vec{a}_2 = \frac{a}{2}(1, 0, 1)$ conectando el átomo del origen de coordenadas con una de las caras, de la siguiente forma la distancia v_s será $v_s = sa\frac{\sqrt{3}}{4} + a\frac{\sqrt{2}}{2}$.

Una vez obtenidas todas las distancias interatómicas podemos construir el lagrangiano en función de estas:

$$\mathcal{L} = K - U = \frac{1}{2}M_1 \sum_s \dot{u}_s + \frac{1}{2}M_2 \sum_s \dot{v}_s - \frac{1}{2}C \sum_s (u_s - v_s)^2 - \frac{1}{2}C \sum_s (u_{s+1} - v_s)^2 \quad (1)$$

4 Ecuaciones de movimiento y soluciones

Para obtener las ecuaciones que describen la dinámica de la red emplearemos las ecuaciones de Euler-Lagrange en función de u_s y v_s haciendo previamente

un cambio de indice s a indice k .

$$u_k : \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{u}_k} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_k} = 0 \quad (2)$$

$$v_k : \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{v}_k} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial v_k} = 0 \quad (3)$$

Desarrollando las ecuaciones obtenemos las siguientes ecuaciones del movimiento:

$$M_1 \ddot{u}_k + C \sum_s (u_s - v_s) \delta_{sk} + C' \sum_s (u_{s+1} - v_s) \delta_{s+1k} = 0 \quad (4)$$

$$M_1 \ddot{v}_k + C \sum_s (u_s - v_s) (-1) \delta_{sk} + C' \sum_s (u_{s+1} - v_s) (-1) \delta_{sk} = 0 \quad (5)$$

Aplicando las deltas de Kronecker se irán los sumatorios.

$$M_1 \ddot{u}_k + C(u_k - v_k) + C'(u_k - v_{k-1}) = 0 \quad (6)$$

$$M_2 \ddot{v}_k + C(v_k - u_k) + C'(v_k - u_{k+1}) = 0 \quad (7)$$

Dado que nuestra red está descrita en base al indice s lo retomaremos para las ecuaciones del movimiento

$$M_1 \ddot{u}_s + C(u_s - v_s) + C'(u_s - v_{s-1}) = 0 \quad (8)$$

$$M_2 \ddot{v}_s + C(v_s - u_s) + C'(v_s - u_{s+1}) = 0 \quad (9)$$

Para resolver las ecuaciones proponemos nuestra solución:

$$u_s = \alpha_k e^{i(ksa\frac{\sqrt{3}}{4} - \omega t)} \quad (10)$$

$$v_s = \beta_k e^{i(k(sa\frac{\sqrt{3}}{4} + a\frac{\sqrt{2}}{2}) - \omega t)} \quad (11)$$

Ahora las sustituiremos en las ecuaciones obtenidas: Si simplificamos ambas ecuaciones dividiendo por $e^{i(ksa\frac{\sqrt{3}}{4} - \omega t)}$ y por $e^{ik(sa\frac{\sqrt{3}}{4} + a\frac{\sqrt{2}}{2}) - \omega t}$ respectivamente

$$-\omega^2 M_1 \alpha_k + C(\alpha_k - \beta_k e^{ika\frac{\sqrt{2}}{2}}) + C'(\alpha_k - \beta_k e^{-ika(\frac{\sqrt{3}}{4} - \frac{\sqrt{2}}{2})}) = 0 \quad (12)$$

$$-\omega^2 M_2 \beta_k + C(\beta_k - \alpha_k e^{-ika\frac{\sqrt{2}}{2}}) + C'(\beta_k - \alpha_k e^{ika(\frac{\sqrt{3}}{4} - \frac{\sqrt{2}}{2})}) = 0 \quad (13)$$

Para obtener soluciones diferentes a la trivial para α_k y β_k el determinante del sistema de ecuaciones debe ser nulo:

$$\begin{vmatrix} C + C' - \omega^2 M_1 & -(Ce^{ika\frac{\sqrt{2}}{2}} + C'e^{-ika(\frac{\sqrt{3}}{4} - \frac{\sqrt{2}}{2})}) \\ -(Ce^{-ika\frac{\sqrt{2}}{2}} + C'e^{ika(\frac{\sqrt{3}}{4} - \frac{\sqrt{2}}{2})}) & C + C' - \omega^2 M_2 \end{vmatrix} = 0 \quad (14)$$

Al calcular el determinante y simplificar el resultado, obtenemos una ecuación de segundo grado en función de ω^2 :

$$\omega^4 M_1 M_2 - \omega^2 (C + C')(M_2 + M_1) + 2CC'(1 - \cos(ka\frac{\sqrt{3}}{4})) = 0 \quad (15)$$

Se puede simplificar como:

$$\omega^4 M_1 M_2 - \omega^2 (C + C')(M_2 + M_1) + 4CC' \sin^2(ka \frac{\sqrt{3}}{8}) = 0 \quad (16)$$

Donde se ha aplicado la relación: $2\sin^2(\frac{\alpha}{2}) = 1 - \cos(\alpha)$ Al solucionarla llegamos a la relación de dispersión:

$$\omega^2 = \frac{(C + C')(M_2 + M_1) \pm \sqrt{(C + C')^2(M_2 + M_1)^2 - 16CC'M_1M_2\sin^2(ka \frac{\sqrt{3}}{8})}}{2M_1M_2} \quad (17)$$

Para representar gráficamente la relación de dispersión normalizaremos los parámetros libres es decir $C = C' = M_1 = M_2 = a = 1$. Haciendo eso la gráfica para ambas ramas siendo la línea azul la rama óptica y la roja la rama acústica tiene la siguiente forma:

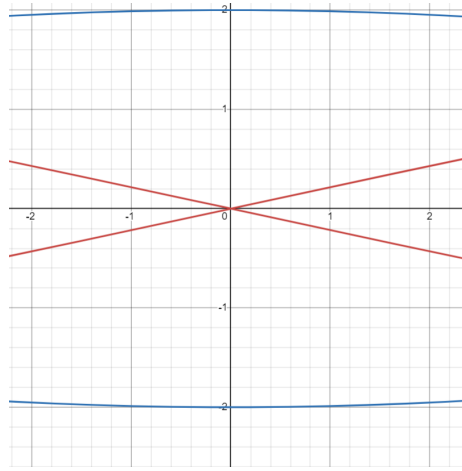


Figure 2: Gráfica relación de dispersión

5 Frecuencia en la Primera Zona de Brillouin

Los modos de difracción en el centro y el borde de la 1ZB corresponden a $k = 0$ y $k = \frac{\pi}{a}$ respectivamente. De este modo las frecuencias serán:

5.1 Rama Óptica

Al sustituir en el centro con $k = 0$ la frecuencia ω es:

$$\omega^2 = \frac{(C + C')(M_2 + M_1) + \sqrt{(C + C')^2(M_2 + M_1)^2}}{2M_1M_2} \quad (18)$$

$$\omega = \sqrt{\frac{(C + C')(M_1 + M_2)}{M_1 M_2}} \quad (19)$$

Para el borde de la 1ZB con $k = \frac{\pi}{a}$ la frecuencia será:

$$\omega^2 = \frac{(C + C')(M_2 + M_1) + \sqrt{(C + C')^2(M_2 + M_1)^2 - 16CC'M_1M_2\sin^2(\pi\frac{\sqrt{3}}{8})}}{2M_1M_2} \quad (20)$$

Expresión que no se puede simplificar más.

5.2 Rama Acústica

Para la rama acústica en el centro de la primera zona de Brillouin, $k = 0$, ω será nula:

$$\omega^2 = \frac{(C + C')(M_1 + M_2) - \sqrt{(C + C')^2(M_1 + M_2)^2}}{2M_1M_2} = 0 \quad (21)$$

Mientras tanto, para el borde con $k = \frac{\pi}{a}$, la frecuencia ω corresponde a:

$$\omega^2 = \frac{(C + C')(M_2 + M_1) - \sqrt{(C + C')^2(M_2 + M_1)^2 - 16CC'M_1M_2\sin^2(\pi\frac{\sqrt{3}}{8})}}{2M_1M_2} \quad (22)$$

Expresión que tampoco se puede simplificar, al igual que en la rama óptica.