Grado en Física, 4º Curso 16 de enero de 2018

Física del Estado Sólido I: Problemas. Soluciones

1. **(30 puntos)** La figura muestra el espacio recíproco de un cristal bidimensional monoatómico de red cuadrada de lado $a = 3.5$ Å. Los puntos negros forman la red recíproca, las líneas negras son los planos de Bragg y las zonas grises las diferentes zonas de Brillouin.

   (a) Calcular las componentes del punto A del espacio recíproco $\vec{k}^A = \left(k_x^A, k_y^A\right)$. En la aproximación de electrones libres, calcular la energía del estado fundamental en el punto A y su degeneración.

   (b) Consideremos que los electrones se ven sometidos a un potencial periódico débil cuya expresión es:

$$U(\vec{r}) = \sum_{n,m=-\infty}^{\infty} V \frac{|n| + |m| - 2}{n^2 + m^2} e^{i2\pi\vec{K}_{n,m}\cdot\vec{r}}$$

   donde en el sumatorio no está incluido el término $n = m = 0$. Además, $\vec{K}_{n,m} = n\vec{b}_1 + m\vec{b}_2$ y $V = 100$ meV. En primer orden de la perturbación, calcular el desdoblamiento de la energía obtenida en el apartado anterior.

   (c) Representar esquemáticamente las bandas de energía en la dirección $\vec{k} = (k, 0)$.

2. **(30 puntos)** Se considera un cristal bidimensional monoatómico con **red cuadrada simple** de constante a. Se supone que sus átomos pueden vibrar solamente en el plano OXY.

   (a) Indicar para qué valores (m, n) tendremos elementos no nulos de la matriz de potencial $D(m, n) \equiv D(\mathbf{R})$, con $\mathbf{R} = a(m\hat{\imath} + n\hat{\jmath})$, si suponemos que cada átomo interacciona únicamente con sus primeros vecinos.

   (b) Utilizar la ley de transformacióon $D(S\mathbf{R}) = SD(\mathbf{R})S^{-1}$ para obtener la forma más general de las matrices $D(\mathbf{R})$ no nulas y las relaciones entre ellas. ¿Cuántos parámetros independientes contienen las constantes de fuerza $D(\mathbf{R})$?

   (c) Obtener la matriz dinámica y los modos normales de vibración. Decir si son modos longitudinales o transversales.

   (d) Al tratarse de un cristal bidimensional, su espectro debe incluir dos ramas acústicas. En cada una de estas ramas, obtener la velocidad del sonido para $\vec{k} = \frac{1}{\sqrt{2}}(k, k)$.

Soluciones

1. (a) Los vectores de base de la red recíproca son los siguientes:

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(1,0) \quad , \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(0,1)$$

El punto A está en la intersección de los planos mediatriz de los vectores $\vec{K}_2 = (2,1)$ y $\vec{K}_3 = (0,2)$ (referidos a la base $\{\vec{b}_1, \vec{b}_2\}$). Podemos establecer las siguientes ecuaciones para la distancia de un punto a un plano:

$$k_x^2 + k_y^2 = (2-k_x)^2 + (1-k_y)^2 \tag{1}$$
$$k_x^2 + k_y^2 = (0-k_x)^2 + (2-k_y)^2 \tag{2}$$

Resolviendo obtenemos las componentes del punto A en la base $\{\vec{b}_1, \vec{b}_2\}$ son:

$$A : \left(\frac{3}{4}, 1\right)$$

La energía en A en el modelo de elctrón libre es,

$$E_0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 4\pi^2}{2ma^2}\frac{25}{16} = \frac{25\pi^2\hbar^2}{8ma^2} = 27 \times 10^{-19}\ \mathrm{J} = 16.78\ \mathrm{eV}$$

con degeneración 3 debido a los dos planos que se intersectan en A.

(b) En el entorno de k_A intervienen los vectores $K_1 = (0,0)$, $\vec{K}_2 = (2,1)$ y $\vec{K}_3 = (0,2)$ en la ecuación:

$$(\mathcal{E} - \mathcal{E}^o_{\mathbf{k}-\mathbf{K}_i})c_{\mathbf{k}-\mathbf{K}_i} = \sum_{j=1}^{m} U_{\mathbf{K}_j-\mathbf{K}_i} c_{\mathbf{k}-\mathbf{K}_j}$$

cuya solución nos lleva la determinate

$$\begin{vmatrix} \varepsilon - E_0 & U_{\vec{K}_2-\vec{K}_1} & U_{\vec{K}_3-\vec{K}_1} \\ U_{\vec{K}_1-\vec{K}_2} & \varepsilon - E_0 & U_{\vec{K}_3-\vec{K}_2} \\ U_{\vec{K}_1-\vec{K}_3} & U_{\vec{K}_2-\vec{K}_3} & \varepsilon - E_0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \varepsilon - E_0 & U_{2,1} & U_{0,2} \\ U_{\bar{2},\bar{1}} & \varepsilon - E_0 & U_{\bar{2},1} \\ U_{0,\bar{2}} & U_{2,\bar{1}} & \varepsilon - E_0 \end{vmatrix} = 0$$

donde los coeficientes del potencial $U_{2,1}$, $U_{0,2}$, $U_{\bar{2},1}$ y sus componentes conjugadas solo los que necesitamos y, según la expresión para el potencial valen:

$$U_{2,1} = U_{\bar{2},\bar{1}} = U_{\bar{2},1} = U_{2,\bar{1}} = V/5, \quad U_{0,2} = U_{0,\bar{2}} = V/4$$

El determinante tiene las componentes:

$$\begin{vmatrix} \varepsilon - E_0 & V/5 & 0 \\ V/5 & \varepsilon - E_0 & V/5 \\ 0 & V/5 & \varepsilon - E_0 \end{vmatrix} = (\varepsilon - E_0)^3 - \frac{2}{25}V^2(\varepsilon - E_0) = 0$$

De donde resultan tres autovalores, $\varepsilon = E_0$ y $\varepsilon = E_0 \pm \frac{\sqrt{2}}{5}V$, resultando las energías, $E = 16.75, 16.78, 16.81$ eV.

(c) La representación para $k = (k, 0)$ es unidimensional. No obstante, todos los coeficientes $U_{2,0} = 0$, por lo que la forma será parabólica.

2. (a) Para una disposición atómica según una red cuadrada, los vectores interatómicos entre próximos vecinos son: $\vec{R} = \pm a\hat{\imath}$ y $\vec{R} = \pm a\hat{\jmath}$, esto es, las componentes vectoriales que tenemos que considerar son, $(n, m) = (0, \pm 1), (\pm 1, 0)$.

(b) Cada matriz $\mathbf{D}(R)$ es bi-dimensional y simétrica, y tendremos tantas como vectores R consideremos (4 próximos vecinos). En general, cada una de ellas tiene la forma

$$\mathbf{D}[0, (1, 0)] = \begin{pmatrix} A & C \\ C & B \end{pmatrix}$$

Dichas matrices son invariantes bajo las transformaciones de simetría de la red cuadrada. En particular, podemos considerar un plano de simetría m_y perpendicular al vector $(0, 1)$

$$m_y = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

que aplicada a la matriz $\mathbf{D}(R)$ anterior implica la condición de invarianza,

$$m_y \mathbf{D}[0, (1, 0)] = \mathbf{D}[0, (1, 0)] m_y \quad \rightarrow \quad \begin{pmatrix} A & C \\ -C & -B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & -C \\ C & -B \end{pmatrix}$$

lo que implica las restricciones,

$$\mathbf{D}[0, (1, 0)] = \begin{pmatrix} A & 0 \\ 0 & B \end{pmatrix}$$

Otra transformación se simetría en la red cuadrada es una rotación de 90^o alrededor de un eje normal al plano de átomos, que viene dada por:

$$C_4 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Dicha transformación de simetría cambia $C_4 \mathbf{R}(1, 0) = \mathbf{R}(0, 1)$. Por lo tanto, aplicándo C_4 a $\mathbf{D}(R(1, 0))$ obtenemos $\mathbf{D}(R(0, 1))$:

$$\mathbf{D}[0, (0, 1)] = \sigma^{-1} \mathbf{D}[0, (1, 0)] \sigma = \begin{pmatrix} B & 0 \\ 0 & A \end{pmatrix}$$

lo que completa la forma de las matrices de constantes de fuerza.

(c) Partimos de la relación dada para la matriz dinámica, que desarrollaremos en forma matricial:

$$\mathbf{D}(\vec{k}) = -2 \sum_{\vec{R}} \mathbf{D}[0, \vec{R}] \sin^2 \frac{\vec{k} \cdot \vec{R}}{2} = -4 \left(\mathbf{D}[0, (1, 0)] \sin^2 \frac{k_x a}{2} + \mathbf{D}[0, (0, 1)] \sin^2 \frac{k_y a}{2} \right)$$

$$\mathbf{D}(\vec{k}) = -4\begin{pmatrix} A\sin^2\frac{k_x a}{2} + B\sin^2\frac{k_y a}{2} & 0 \\ 0 & A\sin^2\frac{k_y a}{2} + B\sin^2\frac{k_x a}{2} \end{pmatrix}$$

que resulta en una matriz diagonalizada, cuyas frecuencias son,

$$\omega_1(k_x, k_y) = \sqrt{\frac{-4(A\sin^2\frac{k_x a}{2} + B\sin^2\frac{k_y a}{2})}{M}} \qquad \varepsilon = (1,0)$$

$$\omega_2(k_x, k_y) = \sqrt{\frac{-4(A\sin^2\frac{k_y a}{2} + B\sin^2\frac{k_x a}{2})}{M}} \qquad \varepsilon = (0,1)$$

Ninguno de los modos corresponde a un modo transversal o longitudinal puro. No obstante, para $k_x = 0$, ω_1 es transversal y ω_2 es longitudinal. Para $k_y = 0$ tenemos lo contrario. Para $kx = \pm k_y$ ambos modos se fusionan en modos con polarización descrita por $\varepsilon = \frac{1}{\sqrt{2}}(1, \pm 1)$, que corresponden a un modo longitudinal y otro transversal..

(d) Para esta dirección, ambas frecuencias son iguales:

$$\omega = \omega_1 = \omega_2 = \sqrt{\frac{-4(A+B)}{M}} \left| \sin\frac{ka}{2\sqrt{2}} \right|$$

en el límite de $k \ll$pequeño,

$$\omega \simeq \sqrt{\frac{-4(A+B)}{M}} \frac{a}{2\sqrt{2}} k = \sqrt{\frac{-(A+B)}{2M}} ak$$

obteniendo para la velocidad del sonido,

$$c \simeq \sqrt{\frac{-(A+B)}{2M}} a$$