

Vamos a estudiar el movimiento de los iones bajo 2 hipótesis:

1- La posición de equilibrio de cada ión es un punto \vec{R} de la red de Bravais.

Por tanto, cada ión oscila alrededor de una posición redia situada a la red de Bravais. Esta posición, \vec{R} , nos servirá para identificar el ión.

El potencial periódico a el que se mueven los e^- es por tanto una especie de potencial periódico.

2- Asumiremos que los desplazamientos de cada ión respecto del equilibrio son pequeños.

Es una primera aproximación que elegimos por comodidad: los términos anarmónicos son importantes (explica, p.ej., la dilatación) pero se tratan como perturbaciones.

DESARROLLO EN SERIE DEL POTENCIAL

Como la posición de equilibrio de los iones es \vec{R} , es lógico tomar como coordenada generalizada el desplazamiento respecto del equilibrio:

$$\vec{u}(\vec{R}) \equiv \vec{r}(\vec{R}) - \vec{R} \Leftrightarrow \vec{r}(\vec{R}) = \vec{R} + \vec{u}(\vec{R})$$

(aquí, \vec{R} es una constante que indica al ión)

Para un sistema de N grados de libertad, la energía interna viene dada por una función

$V(q_1, \dots, q_N)$. Si existe una posición de equilibrio estático (q_{10}, \dots, q_{N0}) entonces:

$$V(q_1, \dots, q_N) = \underbrace{V(q_{10}, \dots, q_{N0})}_{V_0} + \underbrace{\frac{1}{2!} \sum_{i,j} \left. \frac{\partial^2 V}{\partial q_i \partial q_j} \right|_0}_{V^R} (q_i - q_{i0}) (q_j - q_{j0}) + \dots$$

(el término lineal es nulo porque (q_{10}, \dots, q_{N0}) es punto de equilibrio)

(de ahí se aprende la energía por un desplazamiento)

(V incluye la energía de los e^-)

V_0 y más etc. que, si no estamos interesados en variaciones de la posición de equilibrio, se puede ignorar.

p.ej., en algunos cálculos de dilatación

En nuestro caso, el desplazamiento respecto de la posición de equilibrio, dada por $(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_N)$, es $q_i - q_{i0} = u_{\mu}(\vec{R}) \Rightarrow$ cada grado de libertad viene caracterizado por 2 índices: $\mu = \{x, y, z\}$ y

$\vec{R} \in R.B.$ (en total, tengo 3N grados de libertad, que se indica el desplazamiento de cada átomo)
 \vec{R} en 3 índices

Así:

$$U^R = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\vec{R}, \vec{R}' \\ \mu, \nu}} D_{\mu\nu, \vec{R}, \vec{R}'} u_{\mu}(\vec{R}) u_{\nu}(\vec{R}')$$

con \vec{R} y \vec{R}' índices, cantidad de dependencias de cada átomo

con $D_{\mu\nu, \vec{R}, \vec{R}'} = \left. \frac{\partial^2 U(\vec{u}(\vec{R}), \vec{u}(\vec{R}'))}{\partial u_{\mu}(\vec{R}) \partial u_{\nu}(\vec{R}')} \right|_{\vec{u}(\vec{R}_i)=0} = D_{\mu\nu}(\vec{R}, \vec{R}')$

Ahora bien, como el cristal tiene síntesis translacional, $D_{\mu\nu}(\vec{R}, \vec{R}') = D_{\mu\nu}(\vec{R} + \vec{R}'', \vec{R}' + \vec{R}'') \forall \vec{R}'' \in R.B.$
 La simetría es periódica, se desplaza todos los átomos por el cristal R.P. etc.
 El cristal entero le va a seguir

es decir, $D_{\mu\nu}(\vec{R}, \vec{R}') = D_{\mu\nu}(\vec{R} - \vec{R}')$

Por tanto:

$$U^R = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\vec{R}, \vec{R}' \\ \mu, \nu}} u_{\mu}(\vec{R}) D_{\mu\nu}(\vec{R} - \vec{R}') u_{\nu}(\vec{R}')$$

Es 3x3 de simetría física

$$D_{\mu\nu}(\vec{R} - \vec{R}') = \left. \frac{\partial^2 U}{\partial u_{\mu}(\vec{R}) \partial u_{\nu}(\vec{R}')} \right|_{\vec{u}(\vec{R}_i)=0}$$

la física es simétrica

$D_{\mu\nu}$ es una matriz 3x3 definida para cada vector $\vec{R} \in R.B.$
 Esto es como cuando en 1D aproximamos el potencial alrededor del punto de equilibrio por una parábola:
 $L = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - \frac{1}{2} \gamma x^2 \Rightarrow m \ddot{x} + \gamma x = 0 \Rightarrow x = x_0 e^{i\omega t} \rightarrow$ la x física se halla tomando la parte real: $x = x_0 \cos(\omega t + \delta)$

El libro hace una distinción suponiendo que las interacciones son a pares, lo cual no es cierto porque al ser cada ión un sistema compuesto, la posición de un tercer ión puede modificar las nubes electrónicas, y así modificar la forma de la interacción.

Son útiles porque cualquier vector se puede poner en C.L. de los modos normales expandiendo la C.L. en modos normales: \rightarrow resolver un problema de física, oscilaciones, o, como en este caso, hacer un cálculo de base con $\ddot{Q}_i + \omega_i^2 Q_i = 0$

$$t=0: \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = Q_{10} \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} + Q_{20} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} + Q_{30} \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Coordenadas normales

Y así cómo evoluciona cada modo normal (se puede llamar $Q_{j0} e^{i\omega_j t} \equiv Q_j(t)$)

$$t \neq 0: \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = Q_{10} \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{i\omega_1 t} + Q_{20} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} e^{i\omega_2 t} + Q_{30} \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ 1 \end{pmatrix} e^{i\omega_3 t}$$

\rightarrow Para $\omega_2 = 0 \rightarrow$ LOS MODOS DE FRECUENCIA 0 NO SON OSCILACIONES, SINO MOVIMIENTOS UNIFORMES

Existe un método mecánico para hacer esto. Como $L = T - V = \frac{1}{2} m [\dot{\xi}_1^2 + \dot{\xi}_2^2 + \dot{\xi}_3^2] - \frac{1}{2} \gamma [(\xi_2 - \xi_1)^2 + (\xi_3 - \xi_2)^2]$

\downarrow
Lograr obtener de $\xi_1 - \xi_2$ y $\xi_2 - \xi_3$ la integral de movimiento

o, directamente:

$$m \ddot{\xi}_1 = -\gamma (\xi_1 - \xi_2)$$

$$m \ddot{\xi}_2 = -\gamma (2\xi_2 - \xi_1 - \xi_3)$$

$$m \ddot{\xi}_3 = -\gamma (\xi_3 - \xi_2)$$

Check: si $\xi_1 > \xi_2$, el muelle se contrae y la fuerza sobre el puntal 1 es hacia la izquierda (negativa)

hipótesis $\begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \\ \xi_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \xi_{10} \\ \xi_{20} \\ \xi_{30} \end{pmatrix} e^{i\omega t}$

se llega a:

$$\begin{cases} -m\omega^2 \xi_{10} + \gamma(\xi_{10} - \xi_{20}) = 0 \\ -m\omega^2 \xi_{20} + \gamma(2\xi_{20} - \xi_{10} - \xi_{30}) = 0 \\ -m\omega^2 \xi_{30} + \gamma(\xi_{30} - \xi_{20}) = 0 \end{cases}$$

en forma matricial homogénea.

Solo hay solución si:

$$\begin{vmatrix} \gamma - m\omega^2 & 0 & 0 \\ -\gamma & 2\gamma - m\omega^2 & -\gamma \\ 0 & -\gamma & \gamma - m\omega^2 \end{vmatrix} = 0$$

$$(\gamma - m\omega^2)^2 (2\gamma - m\omega^2) - \gamma^2 (\gamma - m\omega^2) = 0$$

$$\gamma = m\omega^2$$

$$\omega_1 = \sqrt{\frac{\gamma}{m}}$$

(el ξ_1 - de los muelles hacia el punto central)

$$(\gamma - m\omega^2) \cdot (2\gamma - m\omega^2) = 2\gamma^2$$

$$2\gamma^2 - \gamma m\omega^2 - 2\gamma m\omega^2 + m^2 \omega^4 = 2\gamma^2$$

$$= 2\gamma^2$$

$$(m\omega^2)^2 - 3\gamma(m\omega^2) = 0$$

$$\omega_2 = 0 \quad \omega_3 = \sqrt{\frac{3\gamma}{m}}$$

sin tanta preferencia, como en E38, si $V = \frac{1}{2} \sum \xi_i V_{ij} \xi_j$ ($V_{ij} = \frac{\partial^2 V}{\partial \xi_i \partial \xi_j}$), el det. es

$|V - (M)\omega^2| = 0$. Atención de los signos \Rightarrow MIPARLO

CADENA LINEAL

Vamos a un caso que nos afecta más: los nodos normales de una red de Bravais monocatómica unidimensional cuyos puntos están separados por una distancia a . (LOS DETALLES SON IMPORTANTES)
 (o sea el caso de las 3 redes estudiadas a N)
 Si trabajamos a primeros vecinos:

$$U^k = \frac{1}{2} \gamma \sum_{\substack{\text{los } \phi''(a) \\ \text{los átomos}}} [u(na) - u([n+1]a)]^2$$

$$-\frac{\partial U^k}{\partial u(na)} = M_{ii} = -\gamma [2u(na) - u([n-1]a) - u([n+1]a)]$$

Recordar: no olvidar por el γ los N grados de libertad

Lo demás queda ser copiar:

$$U^k = \frac{1}{2} \gamma [u(na) - u([n+1]a)]^2 + \frac{1}{2} \gamma [u([n-1]a) - u(na)]^2 + \dots$$

$$\frac{\partial U^k}{\partial u(na)} = \gamma [u(na) - u([n+1]a) - (u([n-1]a) - u(na))] + \dots$$

Si pensamos un poco, es un modelo de masas unidas por muelles de γ . Hay dibujos a la página 479.
 Como siempre, la ecuación del movimiento es diferente para los extremos y para evitar efectos de superficie imponemos C.P.C.:

$$\begin{aligned} u([N+1]a) &\equiv u(a) \\ u(0) &\equiv u(Na) \end{aligned} \quad \forall t \text{ con } N \text{ número de íons}$$

(se definen de por sí mismo los γ)

$\vec{u}(\vec{R} + N\vec{a}_1) = \vec{u}(\vec{R}) \Leftrightarrow$

(intuitivamente, el último y primer íon TAMBIÉN interactúan entre sí debido a γ . Esto nos sirve, pero nos permite estudiar el interior del sólido evitando los efectos de superficie. Todas las masas son equivalentes. Es de hecho un cristal periódico a R.B. que aquí es $\{na\}$)

Los nodos normales son soluciones del estilo:

$$u(na, t) = M_0(na) e^{-i\omega t}$$

a su vez, probamos

$$u(na, t) = M_0 e^{i(kna - \omega t)}$$

(cuando probamos que elegimos esta forma, en cualquier punto Nodos L.1. en $\{na\}$ como es lógico que lo hacemos. El resultado es correcto)

TODA LA DIFERENCIA ES LA MODULACIÓN e^{ikna}

Por C.P.C., con $\forall t$

$$e^{ikNa} = 1 \quad (\text{la condición de } k \text{ de Bloch!})$$

$$k = \frac{2\pi m}{a N} \quad (m \in \mathbb{Z})$$

La analogía con Bloch no acaba aquí: $\psi(ma, t)$ es periódico a k ($\tau = \frac{2\pi}{a}$). Así, a nivel de los N diferentes valores de k que se dan diferentes valores reales. (ya he hallado los N modos reales, ahora falta hallar los N frecuencias reales)

Puedo por tanto restringir $k \in [-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}]$. (caso cuando $k \in 1-2\pi$)

Substituyendo en la ecuación del movimiento:

$$M\omega^2 e^{i(kna - \omega t)} = f\gamma [2 - e^{-ika} - e^{ika}] e^{i(kna - \omega t)}$$

$$M\omega^2 = 2\gamma (1 - \cos ka)$$

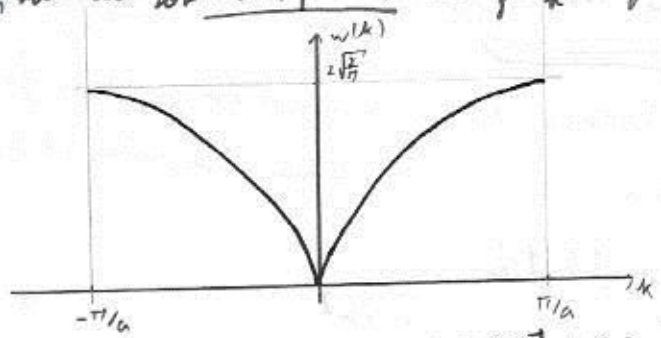
$$\omega(k) = \sqrt{\frac{2\gamma (1 - \cos ka)}{M}}$$

$$\omega(k) = 2\sqrt{\frac{\gamma}{M}} \left| \sin \frac{1}{2} ka \right|$$

\Rightarrow Como $\omega(k)$ es par, cualquier cantidad tomada sobre raíces se da en el doble de soluciones, solo hay que escribir que aparece la $\cos(kna - \omega t - \delta)$ y la solución $(k, -\omega(k))$ es LA MISMA que $(-k, \omega(k)) = (-k, \omega(k))$ solo no por que son angulos idénticos. Esto lo voy a repetir en un momento a ver la misma solución.

Ya tengo las N frecuencias reales \Rightarrow ya he resuelto el problema.

Las soluciones que he hallado son ondas planas con $v_g = \frac{\omega}{k}$; $v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k}$. El plot de la relación de dispersión es:



(K negativo significa onda viajando hacia la izquierda)

DOS COMENTARIOS

Si $k \ll \frac{\pi}{a}$ (a decir, longitud de onda \gg separación interiónica), $\omega = c|k|$, con $c = a\sqrt{\frac{\gamma}{M}}$.

Sin embargo, si $\lambda \sim a$, los modos dejan de ser dispersivos.

Si $k = \pm \frac{\pi}{a}$, $v_g = 0$.

- Si trabajamos con números complejos, la cosa se complica, pero:
 - Los nodos normales siguen siendo ondulatorios con los mismos valores permitidos para k .
 - La relación de dispersión es más compleja, pero se reduce:
 - Si $\lambda \ll a$, es lineal
 - Si $k = \pm \frac{\pi}{a}$, $v_g = 0$.

La coincidencia con las ondas de Bloch no es casual: uno podría definir un operador traslación, que conmuta con L , ^{los CPC dan sentido a la derivada a escala finita} por lo que el ansatz que probamos, $e^{i(kna - \omega t)}$, es una onda de Bloch para un sistema periódico (por eso aparece la cuantización), que diagonalizará el problema.

CADENA LINEAL CON BASE

• Vamos a estudiar una cadena con base:

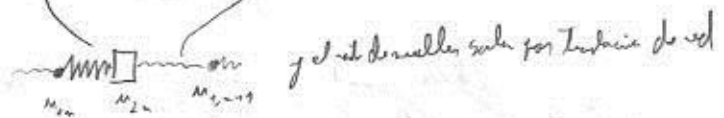


Supondremos que las masas de los iones son iguales, aunque los sites de los iones diferentes (por ser diferentes las distancias).

• La constante de red es a , y usaremos las etiquetas m_{1n} y m_{2n} para los desplazamientos de los iones 1 y 2 situados en la n -ésima celda primitiva. (e.g. $m_1(\vec{r})$ y $m_2(\vec{r})$)

• Como antes, la energía vale:

$$V^k = \frac{1}{2} \delta \sum_n (m_{2n} - m_{1n})^2 + \frac{1}{2} \gamma \sum_n (m_{1n+1} - m_{2n})^2$$



• Tengo un conjunto de N ecuaciones del momento para cada ión:

$$m \ddot{u}_{1n} = - \frac{\partial V^k}{\partial u_{1n}} = - \delta [u_{1n} - u_{2n}] - \gamma [u_{1n} - u_{2n+1}]$$

$\delta > 0$, $m_1 < m_2$, $\gamma > 0$, $F > 0$ ↑ puñal de la red
 $\delta < 0$, $m_1 > m_2$, $\gamma > 0$, $F < 0$ ↑ puñal de la red

$$m \ddot{u}_{2n} = - \frac{\partial V^k}{\partial u_{2n}} = - \delta [u_{2n} - u_{1n}] - \gamma [u_{2n} - u_{1n+1}]$$

De nuevo, la derivada es copiosa. Para no liarse, renombro índices:

$$U^h = \frac{\delta}{2} \sum_i [u_{1,i} - u_{2,i}]^2 + \frac{\gamma}{2} \sum_i [u_{2,i} - u_{1,i+1}]^2$$

$$\frac{\partial U^h}{\partial u_{2n}} = \delta \sum_i [u_{1,i} - u_{2,i}] \delta_{ni} + \gamma \sum_i [u_{2,i} - u_{1,i+1}] \cdot \begin{matrix} \delta_{i+1,n} \\ \delta_{i,n-1} \end{matrix} =$$

$$= \delta [u_{1,n} - u_{2,n}] - \gamma [u_{2,n-1} - u_{1,n-1}]$$

$$\frac{\partial U^h}{\partial u_{2n}} = -\delta \sum_i [u_{1,i} - u_{2,i}] \delta_{ni} + \gamma \sum_i [u_{2,i} - u_{1,i+1}] \delta_{ni} =$$

$$= -\delta [u_{1,n} - u_{2,n}] + \gamma [u_{2,n} - u_{1,n+1}]$$

Como antes, debido a la simetría del cristal, propongo:

$$u_{1,n} = \epsilon_1 e^{i(kna - \omega t)}$$

$$u_{2,n} = \epsilon_2 e^{i(kna - \omega t)}$$

(por CIC también los números cuánticos de momento: de k)

donde, si bien los átomos idénticos tienen desplazamiento solo por e^{ikna} , PUEDE

HABER DESFASES DENTRO DE CADA

CELDA PRIMITIVA (y ojo, en cada celda se puede estar vibrando para el mismo ω y k en direcciones opuestas)

entonces, los ϵ son las fases dentro de las celdas primitivas $n=0$. (El índice explícito relativo a priori $\neq 1$ por units)

Como siempre, celdas primitivas diferentes oscilan al mismo.

Sustituyendo:

$$-\omega^2 \epsilon_1 e^{i(kna - \omega t)} = -\delta [\epsilon_1 e^{i(kna - \omega t)} - \epsilon_2 e^{i(kna - \omega t)}] - \gamma [\epsilon_1 e^{i(kna - \omega t)} - \epsilon_2 e^{-i(kna - \omega t)}]$$

$$-\omega^2 \epsilon_2 e^{i(kna - \omega t)} = -\delta [\epsilon_2 e^{i(kna - \omega t)} - \epsilon_1 e^{i(kna - \omega t)}] - \gamma [\epsilon_2 e^{i(kna - \omega t)} - \epsilon_1 e^{-i(kna - \omega t)}]$$

$$\begin{cases} [m\omega^2 - (\gamma + \delta)] \varepsilon_1 + [\delta + \gamma e^{-ika}] \varepsilon_2 = 0 \\ -[\delta + \gamma e^{ika}] \varepsilon_1 + [m\omega^2 - (\gamma + \delta)] \varepsilon_2 = 0 \end{cases}$$

→ El punto de dispersión es entre $2N \times 2N$ o en 2×2 para obtener resultados de k

Es un sistema homogéneo. Para que $(\varepsilon_1, \varepsilon_2) \neq (0, 0)$, debe tenerse:

$$\begin{vmatrix} m\omega^2 - (\gamma + \delta) & \delta + \gamma e^{-ika} \\ \delta + \gamma e^{ika} & m\omega^2 - (\gamma + \delta) \end{vmatrix} = 0$$

$$[m\omega^2 - (\gamma + \delta)]^2 = |\delta + \gamma e^{ika}|^2 = \delta^2 + \gamma^2 + 2\gamma\delta \cos ka$$

4, 2, 2!!!

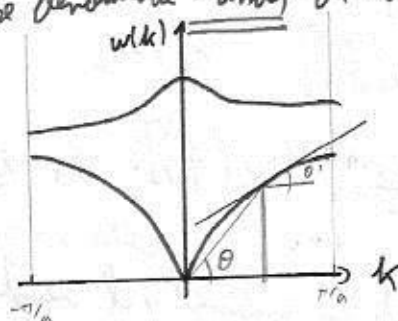
$$\omega^2 = \frac{\gamma + \delta}{m} \pm \frac{1}{m} \sqrt{\delta^2 + \gamma^2 + 2\gamma\delta \cos ka}$$

(...)

$$\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1} = \mp \frac{\delta + \gamma e^{ika}}{|\delta + \gamma e^{ika}|}$$

Para cada valor permitido de k , habrá 2 frecuencias \Rightarrow heos hallado los $2N$ modos normales.
(hay $2N$ grados de libertad. N modos 2 atomos por celda)

Hay bandas lo que se denominan ramas de la relación de dispersión:



$$v_g = \frac{\omega}{k} \cdot \cos \theta$$

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \cos \theta'$$

Con la rama inferior contiene frecuencias altamente pequeñas, se denomina rama acústica. La otra es la rama óptica. (es que las frecuencias de la óptica son altas para $k \rightarrow 0$)

Ver que, salvo para longitudes de onda grandes en la rama acústica, el medio es altamente dispersivo, con menores frecuencias como $v_g > 0$ y $v_g < 0$.

Ver la estudio de regiones para fijar ideas:

$k \ll \pi/a$ (longitud de onda $\gg a$)

$\omega_0 = \sqrt{\frac{2(\delta + \gamma)}{m}} - O((ka)^2) ; \epsilon_2 = -\epsilon_1$

$\omega_A = \sqrt{\frac{\gamma \delta}{2m(\gamma + \delta)}} ka ; \epsilon_2 = \epsilon_1$
la velocidad del sonido

- Caso $k \ll \pi/a$, todas las celdas primitivas están a fase, si bien a el caso óptico dentro de cada celda hay vibraciones opuestas. (fig. 22.11)
- Si $k=0$, el modo acústico es una trabaja, mientras que a el óptico cada celda primitiva vibra como si fuera una solécula.

$k = \pi/a$

$\omega_0 = \sqrt{\frac{2\delta}{m}} ; \epsilon_1 = -\epsilon_2$ (fig. 22.12)

$\omega_A = \sqrt{\frac{2\gamma}{m}} ; \epsilon_1 = \epsilon_2$

- Celdas próximas están a contrafase.
- El modo acústico excita el muelle blando, como si cada celda fuera una masa rígida; mientras que el óptico excita el duro, como si cada celda primitiva vibrara independientemente.

En más, si $\delta \gg \gamma$ (como si los muelles fueran una solécula fuertemente unida):

$\omega_0 = \sqrt{\frac{2\delta}{m}} [1 + O(\frac{\gamma}{\delta})] ; \epsilon_1 = -\epsilon_2$

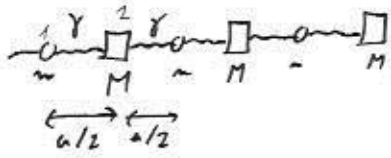
$\omega_A = \sqrt{\frac{2\gamma}{m}} |a \frac{ka}{2}| [1 + O(\frac{\gamma}{\delta})] ; \epsilon_1 = \epsilon_2$

- El modo óptico excita solécula, y el acústico excita todas las soléculas de forma colectiva.

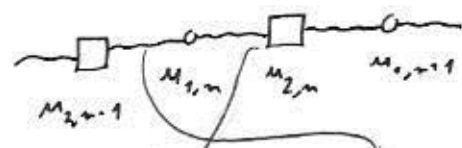
Aún, una masa se dice acústica si $\omega(0) = 0$. Intuitivamente, corresponde a vibraciones colectivas de las celdas.

Siempre existe porque la traducción ($\omega=0, k=0$) es siempre un modo normal. Los dos modos, ópticos, son intuitivamente vibraciones dentro de cada celda.

Ejemplo: cadena diatómica con masas diferentes:



Ecuaciones del movimiento:



$$m \ddot{u}_{1,n} = \gamma [m_{2,n} - m_{1,n}] - \gamma [m_{1,n} - m_{2,n+1}]$$

$\left\{ \begin{array}{l} m_{1,n} > m_{2,n}, \text{ el muelle} \\ \text{está tirado a la izquierda} \end{array} \right.$
 $\left\{ \begin{array}{l} m_{1,n} > m_{2,n+1}, \text{ el muelle} \\ \text{está tirado a la derecha} \end{array} \right.$

$$M \ddot{u}_{2,n} = \gamma [m_{1,n+1} - m_{2,n}] - \gamma [m_{2,n} - m_{1,n}]$$

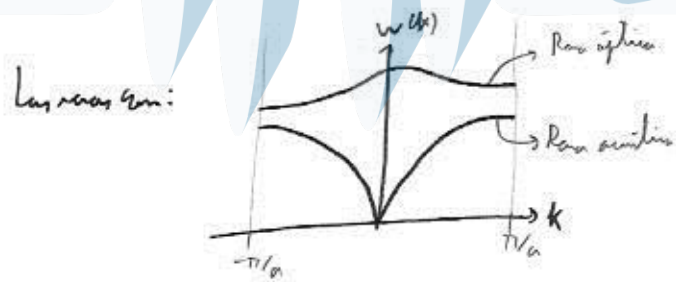
Puedo:

$$m_{1,n} = \epsilon_1 e^{i(kna - \omega t)}$$

$$m_{2,n} = \epsilon_2 e^{i(kna - \omega t)}$$

$$\begin{pmatrix} 2\gamma - m\omega^2 & -\gamma(1 + e^{-ika}) \\ -\gamma(1 + e^{ika}) & 2\gamma - M\omega^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

(E42 b)) $\omega_{\pm}^2(k) = \frac{\gamma}{mM} \left[m + M \pm \sqrt{m^2 M^2 + 2mM \cos ka} \right]$



\$\Rightarrow\$ tengo 2 modos normales

Verifica la rama acústica. Comportamiento a \$\omega_-\$ para $\omega_-^2(0) = \frac{\gamma}{mM} [m + M - \sqrt{(m+M)^2}] = 0$

Para \$k=0\$:

$$\omega_-^2 = 0$$

$$\omega_+^2 = 2\gamma \frac{M_{max}}{M_{min}} = \frac{2\gamma}{M}$$

\$\bullet\$ \$\omega_-\$: $\begin{pmatrix} 2\gamma & -2\gamma \\ -2\gamma & 2\gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \epsilon_1 = \epsilon_2 \Rightarrow \text{Modo acústico}$

\$\bullet\$ \$\omega_+\$: (...) $\begin{pmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \end{pmatrix} \propto \begin{pmatrix} M \\ -m \end{pmatrix} \Rightarrow \text{el CM de cada celda no se mueve}$

RED DE BRAVAIS TRIDIMENSIONAL (las columnas de la matriz)

Nos enfrentamos a encontrar los vectores normales de (en notación matricial):

$$V^h = \frac{1}{2} \sum_{\vec{R}, \vec{R}'} \vec{u}(\vec{R}) D(\vec{R}-\vec{R}') \vec{u}(\vec{R}')$$

para lo cual estudiamos las secciones de D . (son FUNDAMENTALES)

SIMETRÍA 1

$$\begin{aligned} D_{\mu\nu}(\vec{R}-\vec{R}') &= D_{\nu\mu}(\vec{R}'-\vec{R}) \\ \Downarrow \\ D(\vec{R}-\vec{R}') &= D^t(\vec{R}'-\vec{R}) \end{aligned}$$

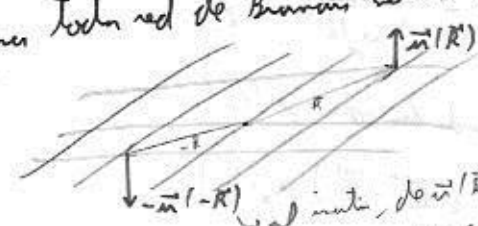
Se puede entender por ser D una forma cuadrática o, mejor, porque $D_{\mu\nu}(\vec{R}-\vec{R}') = \frac{\partial^2 U}{\partial x_\mu(\vec{R}) \partial x_\nu(\vec{R}')}$ y los derivados conmutan: si cambias TODOS los índices de D , esta queda igual. (ambos \vec{R} y \vec{R}' en los índices)

SIMETRÍA 2

$$\begin{aligned} D_{\mu\nu}(\vec{R}-\vec{R}') &= D_{\mu\nu}(\vec{R}'-\vec{R}) \\ \Downarrow \\ D(\vec{R}) &= D(-\vec{R}) \end{aligned}$$

1+2 \Rightarrow D es una matriz simétrica y par en \vec{R}

La deducción de 2 es sutil. Por tener toda red de Bravais cierta inversión, V^h es invariante frente al cambio $\vec{u}(\vec{R}) \rightarrow -\vec{u}(-\vec{R})$



$$V^h = \frac{1}{2} \sum_{\vec{R}, \vec{R}'} \vec{u}(\vec{R}) D(\vec{R}-\vec{R}') \vec{u}(\vec{R}') = \frac{1}{2} \sum_{\vec{R}, \vec{R}'} (+\vec{u}(-\vec{R})) D(\vec{R}-\vec{R}') (+\vec{u}(-\vec{R}')) = \left| \begin{array}{l} \vec{R} = -\vec{R} \\ \vec{R}' = -\vec{R}' \end{array} \right. \begin{array}{l} \text{por simetría, P.R.} \\ \text{queda igual y} \\ \text{Jacobian tl.} \end{array}$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\vec{R}, \vec{R}'} \vec{u}(\vec{R}) D(-\vec{R}, -\vec{R}') \vec{u}(\vec{R}')$$

es decir, $D(\vec{R}-\vec{R}') = D(\vec{R}'-\vec{R})$

En notación vectorial:

$$M \ddot{\vec{u}}(\vec{R}) = - \sum_{\vec{R}'} \vec{D}(\vec{R} - \vec{R}') \vec{u}(\vec{R}')$$

Como 1D, buscaremos soluciones del estilo:

$$\vec{u}(\vec{R}) = \vec{E} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{R} - \omega t)}$$

donde \vec{E} , como para todos los iones, representa la dirección de la oscilación (o el vector de polarización), y se puede elegir como la amplitud de la celda $\vec{R}=0$.

Las CPC imponen: (ver pg 116)

$$\vec{k} = \frac{n_1}{N_1} \vec{l}_1 + \frac{n_2}{N_2} \vec{l}_2 + \frac{n_3}{N_3} \vec{l}_3 \quad (n_i \in \mathbb{Z})$$

Substituyendo el Ansatz en la ecuación del movimiento:

$$+ \omega^2 M \vec{E} e^{i \vec{k} \cdot \vec{R}} = + \sum_{\vec{R}'} \vec{D}(\vec{R} - \vec{R}') e^{i \vec{k} \cdot \vec{R}'} \vec{E}$$

$$M \omega^2 \vec{E} = \sum_{\vec{R}'} \vec{D}(\vec{R} - \vec{R}') e^{-i \vec{k} \cdot (\vec{R} - \vec{R}')} \vec{E}$$

haciendo un cambio de vel $\vec{R} \rightarrow \vec{R} - \vec{R}'$ (lleva el origen que estoy estudiando al origen: por simetría traslacional)

$$\boxed{D(\vec{k}) \vec{E} = M \omega^2 \vec{E}}$$

con $D(\vec{k}) = \sum_{\vec{R}} \vec{D}(\vec{R}) e^{-i \vec{k} \cdot \vec{R}}$ (la transformada de Fourier de \vec{D})

$\vec{D}(\vec{r})$ es la suma de los \vec{D} de los vecinos de \vec{r}

Es decir, diagonalizamos la matriz dinámica $D(\vec{k})$ nos da tanto las frecuencias normales como las direcciones de oscilación para cada \vec{k} . \Rightarrow Por el cambio de base, nos queda de un matriz $3N \times 3N$ o N matrices 3×3 (cada \vec{k}) 3×3 .

Vamos a analizar el comportamiento para $\vec{k} \rightarrow 0$. ($D(\vec{k}) \neq 0$ por lo tanto ¿pero queremos saber cómo lo hace?)

$$D(\vec{k}) = \sum_{\vec{R}} D(\vec{R}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}} = \frac{1}{2} \left[\sum_{\vec{R}} D(\vec{R}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}} + \sum_{\vec{R}} D(\vec{R}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}} - 2 \sum_{\vec{R}} D(\vec{R}) \right] =$$

añadiendo
límite para $\vec{k} \rightarrow 0$
 $D(\vec{R}) \neq 0$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\vec{R}} D(\vec{R}) \cdot [e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} - 2] = \sum_{\vec{R}} D(\vec{R}) [\cos \vec{k} \cdot \vec{R} - 1] =$$

$D(\vec{R}) = D(-\vec{R})$

$$= -2 \sum_{\vec{R}} D(\vec{R}) \sin^2 \left(\frac{1}{2} \vec{k} \cdot \vec{R} \right)$$

Entonces dice delante: (traduce las ideas de $D(\vec{R})$ de forma indirecta)

$D(\vec{k})$ es una matriz real, simétrica y par en \vec{k}

$D(\vec{k})$ va a 0 si $\vec{k} \rightarrow 0$, y además $\propto k^2 \Rightarrow$ los autovalores son $\propto k^2 \Rightarrow$

límite $\propto M \omega^2$

\Rightarrow si $\vec{k} \rightarrow 0$, $\omega \propto k \Rightarrow$ SONIDO

Vamos a explotar esto último: al ser $D(\vec{k})$ real simétrica, tiene 3 autovalores reales (λ_s positivos que se pueden considerar > 0), y tres ejes de polarización y frecuencias reales:

$$\omega_s(\vec{k}) = \sqrt{\frac{\lambda_s(\vec{k})}{M}} \quad s \in \{1, 2, 3\}$$

$$\vec{E}_s(\vec{k}); \quad \vec{E}_s \cdot \vec{E}_{s'} = \delta_{ss'} \quad (\text{las polarizaciones de los autovalores son ortogonales entre sí})$$

\rightarrow ojo que la elección entre \vec{E} y \vec{k} es arbitraria, a priori puede ser cualquiera

Si $\vec{k} \rightarrow 0$, escribiendo $\vec{k} = k \hat{a}_k$, $D(\vec{k}) \rightarrow -\frac{k^2}{2} \sum_{\vec{R}} (\hat{a}_k \cdot \vec{R})^2 D(\vec{R})$

\Downarrow

$\omega_s(\vec{k}) = c_s(\hat{a}_k) k \quad ; \quad s \in \{1, 2, 3\}$

ESENCIAL \leftarrow

La relación, aunque no sea dispersiva, es anisotrópica: hay 3 velocidades del sonido para cada dirección de propagación. (por los c_s depende de la dirección de \vec{k} o de \hat{a}_k)

Cada velocidad corresponde a una polarización diferente de la onda sonora. (p.ej. a una onda longitudinal como el sonido y transverales)

En un medio isótropo, por simetría, uno siempre puede elegir dos ramas con $\vec{E} \perp \vec{k}$ (ramas transversales) y otra con $\vec{E} \parallel \vec{k}$ (rama longitudinal). (siempre se define y se elige un eje propio)

Si el sólido es anisótropo, la orientación de las polarizaciones es altamente no trivial y solo polarizaciones exóticas. (Si se usa dirección de \vec{k} en x, y, z , longitudinales, o sea uno es de las longitudinales pero a lo más $\forall \vec{k}$ por ser \vec{E} perpendicular a \vec{k})

Si tenemos un red de Bravais con b bases, con p iones por celda; a general en d dimensiones hay N el p modos normales. (el grado de libertad por i , y N por iones a todo el cristal por haber N celdas)

• La relación de ortogonalidad canónica: $\sum_{i=1}^n \vec{E}_s^{i\alpha}(\vec{k}) \vec{E}_{s'}^{i\beta}(\vec{k}) M_i = \delta_{ss'} \delta_{\alpha\beta}$ (si α, β índices de iones)

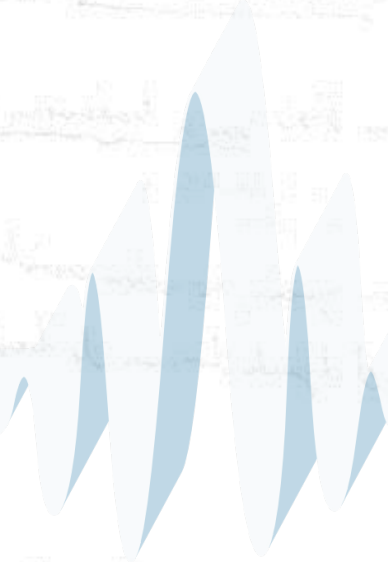
• Con hay N valores de \vec{k} , hay $p \cdot d$ ramas \Rightarrow sempre aparecen las ramas ópticas

• Los modos acústicos son, recordando, los que para $\vec{k} \rightarrow 0$ van a translaciones ($\omega = 0$).
U todas las celdas de la red se desplazan

Como las translaciones no acaban de ser iguales, los \vec{E} son iguales, los modos acústicos salen de diagonalizar una matriz $d \times d$ y, al haber d diferentes direcciones de translación, hay siempre d ramas acústicas.

• Los modos ópticos aparecen si hay más de un átomo por celda. En general, \vec{E}^i depende de i , hay desplazamientos internos dentro de cada celda y para $\vec{k} = 0$ (todas las celdas se mueven al mismo) dentro de cada celda hay desplazamientos y oscilaciones: $\omega(0) \neq 0$.

Con hay $p \cdot d$ ramas d son acústicas, hay $d(p-1)$ ramas ópticas. (si $p=1$ no se cuenta)



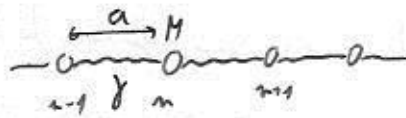
Zimatek

LÍMITE CONTINUO

• Taylor para Δu
 • Sumas Riemann

• Derivamos la elasticidad clásica tomando el límite continuo.

• Trabajamos con un cristal unidimensional con interacción a primeros vecinos: (manejamos fórmulas para hacer un ejemplo 3D-1D)



• La energía elástica vale $V^h = \frac{1}{2} \gamma \sum_n (u_{n+1} - u_n)^2 \equiv \frac{1}{2} \gamma \sum_n [u(na+a) - u(na)]^2$ (1)

La idea va a ser hacer un desarrollo de Taylor, para lo que no necesitamos tener diferencias de desplazamientos

• Hacemos un desarrollo de Taylor a primer orden porque en el límite continuo apenas varía entre vecinos próximos (en hacer un desarrollo de Taylor de $u(x)$, a priori $\lambda \gg a$)

$$u(na+a) = u(na) + a u'(na) + \dots \quad (2)$$

\Downarrow

$$V^h = \frac{1}{2} \sum_n \gamma a^2 [u'(na)]^2 \equiv \frac{1}{2} \sum_n E [u'(na)]^2 \quad (3)$$

con $E = \gamma a^2$ (4)

• Vamos a hacer el límite continuo: sustituimos la variable discreta n a por una variable continua x

$$V^h = \frac{1}{2} \sum_n E [u'(na)]^2 \sim \frac{1}{2} \int_0^L E [u'(na)]^2 dn \stackrel{\text{al límite}}{\underset{\lambda \gg a}{\approx}} \frac{1}{2} \int_0^L dx \frac{E}{a} u'(x)^2$$

esto se puede escribir:

$$V^h = \frac{1}{2} \int_0^L dx \bar{E} u'(x)^2 \quad (5)$$

con $\bar{E} \equiv \frac{E}{a} = \gamma a$ (6)

• Es decir, V^h es una forma cuadrática a los derivados de los desplazamientos, que es la ligadura básica de la elasticidad lineal. (cuadrática para cada átomo, ya los derivados p.e. a los desplazamientos todos iguales \Rightarrow no depende de x ; tampoco traducción, que no varía la energía del sitio al dejar igual las distancias interatómicas)

Además, (6) no liga propiedades macroscópicas y microscópicas.

Veremos primero 3D:

$$V^L = \frac{1}{2} \sum_{\vec{R}, \vec{R}'} \tilde{u}(\vec{R}) D(\vec{R} - \vec{R}') \tilde{u}(\vec{R}')$$

para hacer desarrollo de Taylor, recueto por los casos de diferencias de desplazamientos:

$$V^L = -\frac{1}{4} \sum_{\vec{R}, \vec{R}'} [\tilde{u}(\vec{R}') - \tilde{u}(\vec{R})] D(\vec{R} - \vec{R}') [\tilde{u}(\vec{R}') - \tilde{u}(\vec{R})] \quad (1)$$

Es útil: $-\tilde{u}(\vec{R}') D(\vec{R} - \vec{R}') \tilde{u}(\vec{R}) = -\tilde{u}(\vec{R}) D(\vec{R} - \vec{R}') \tilde{u}(\vec{R}')$ sin más que hacer un cambio de variable
 nada $\vec{R} \leftrightarrow \vec{R}'$ y usando $D(\vec{R}) = D(-\vec{R}) \Rightarrow$ de la fórmula original

los términos cuando se van. Como $D(\vec{R}) = D(-\vec{R})$, basta con evaluar uno (el otro original)

$$\sum_{\vec{R}, \vec{R}'} \tilde{u}(\vec{R}) D(\vec{R} - \vec{R}') \tilde{u}(\vec{R}') = \left. \begin{array}{l} \vec{R} - \vec{R}' = \vec{R}'' \\ \text{funciones pares por pares, constantes y plenas } \sum_{\vec{R}''=0} \end{array} \right| =$$

$$= \sum_{\vec{R}, \vec{R}''} \tilde{u}(\vec{R}) D(\vec{R}'') \tilde{u}(\vec{R}) = \sum_{\mu, \nu} M_{\mu}(\vec{R}) D_{\mu\nu}(\vec{R}'') M_{\nu}(\vec{R})$$

$$= \sum_{\vec{R}} \sum_{\mu, \nu} M_{\mu}(\vec{R}) M_{\nu}(\vec{R}) \left(\sum_{\vec{R}''} D_{\mu\nu}(\vec{R}'') \right) = 0$$

"" = 0, véase 3

En el límite continuo:

$$\tilde{u}(\vec{R}') = \tilde{u}(\vec{R}) + (\vec{R}' - \vec{R}) \cdot \vec{\nabla} \tilde{u}(\vec{R}) + \dots \quad (2)$$

$$u_{\alpha}(\vec{R}') - u_{\alpha}(\vec{R}) = \sum_{\beta} (R'_{\beta} - R_{\beta}) \frac{\partial u_{\alpha}(\vec{R})}{\partial x_{\beta}} \quad 1 \dots$$

por tanto, en (1) por partes:

$$V^L = -\frac{1}{4} \sum_{\substack{\vec{R}, \vec{R}' \\ \mu, \nu \\ \sigma, \tau}} (R'_{\sigma} - R_{\sigma}) \frac{\partial}{\partial x_{\sigma}} M_{\mu}(\vec{R}) D_{\mu\nu}(\vec{R} - \vec{R}') (R'_{\tau} - R_{\tau}) \frac{\partial}{\partial x_{\tau}} M_{\nu}(\vec{R})$$

$$V^L = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\vec{R} \\ \mu, \nu \\ \sigma, \tau}} \underbrace{\left(\frac{\partial}{\partial x_{\sigma}} M_{\mu}(\vec{R}) \right)}_{\text{quadrado}} \underbrace{\left(\frac{\partial}{\partial x_{\tau}} M_{\nu}(\vec{R}) \right)}_{\text{quadrado}} \underbrace{E_{\sigma\mu\tau\nu}}_{\text{Matriz } 4 \times 4} \quad (3)$$

con

$$E_{\sigma\mu\tau\nu} = -\frac{1}{2} \sum_{\vec{R}'} (R'_{\sigma} - R_{\sigma}) D_{\mu\nu}(\vec{R} - \vec{R}') (R'_{\tau} - R_{\tau})$$

si hago el cambio de variable $\vec{R}'' = \vec{R}' - \vec{R}$ (atención, $\nu R''$ y $\vec{R}' - \vec{R}$ se convierten a R, σ)

$$E_{\sigma\mu\tau\nu} = -\frac{1}{2} \sum_{\vec{R}''} R''_{\sigma} D_{\mu\nu}(-\vec{R}'') R''_{\tau}$$

con \vec{R}'' usando y por la simetría 3:

$$E_{\sigma\mu\tau\nu} = -\frac{1}{2} \sum_{\vec{R}} R_{\sigma} D_{\mu\nu}(\vec{R}) R_{\tau} \quad (4) \rightarrow \text{más limpio que el 1D porque usa } D_{\mu\nu}$$

Se puede convertir (3) en una integral usando $\sum_{\vec{R} \in \text{CP}} \rightarrow \int_{\text{CP}} d^3\vec{r}$ teniendo cuidado que el volumen cambia al espacio directo al cambio \vec{R} es v_{CP} .

$$U^R = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\mu\nu \\ \sigma\tau}} \frac{1}{v_{CP}} \int_{\text{CP}} \partial_{\sigma} M_{\mu}(\vec{r}) E_{\sigma\mu\tau\nu} \partial_{\tau} M_{\nu}(\vec{r})$$

Dijo que...
 como se refiere al
 volumen $\int d^3r \rightarrow \int d^3\vec{r}$

$$U^R = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\mu\nu \\ \sigma\tau}} \int_{\text{CP}} \partial_{\sigma} M_{\mu}(\vec{r}) \bar{E}_{\sigma\mu\tau\nu} \partial_{\tau} M_{\nu}(\vec{r}) \quad (5)$$

con

$$\bar{E} = \frac{E}{v_{CP}} \quad (6)$$

- Este es el punto de partida de la elasticidad lineal clásica: una forma compacta a los derivados de los desplazamientos que son matrices 3×3 .
- Vamos a simplificar esto. Además de, por (4), la relación al intercambio $\tau \leftrightarrow \sigma$ y el intercambio $\mu \leftrightarrow \nu$, sabemos que si rotamos todo el sólido su energía elástica no varía. (al depender de los derivados, se satisface que U^R es invariante ante traslaciones)

Es decir, bajo el siguiente campo de desplazamientos, correspondiente a una rotación infinitesimal:

$$\vec{u}(\vec{r}) = \delta \vec{\theta} \times \vec{r}$$

debe tenerse $V^R = 0$.

$$u_i = \epsilon_{ijk} \delta \theta_j x_k$$

$$\partial_\rho u_i = \epsilon_{ijk} \delta \theta_j \delta_{\rho k} = \epsilon_{ij\rho} \delta \theta_j = \epsilon_{\rho ij} \delta \theta_j$$

es decir, un tensor antisimétrico:

$$\partial_i u_j = \begin{pmatrix} 0 & \delta \theta_2 & -\delta \theta_3 \\ -\delta \theta_2 & 0 & \delta \theta_1 \\ \delta \theta_3 & -\delta \theta_1 & 0 \end{pmatrix}$$

Los desplazamientos $\delta \vec{\theta}$ expansiono en una matriz

Es decir, matrices de derivadas antisimétricas dan lugar a rotaciones.

(que son diferenciales de orden tres
pues, al ser la integral queda proporcional
a la rotación)

Anc. separando la matriz de derivadas en parte simétrica y antisimétrica

$$\partial_\sigma u_\mu = \underbrace{\frac{1}{2} (\partial_\sigma u_\mu + \partial_\mu u_\sigma)}_{\epsilon_{\sigma\mu} \Rightarrow \text{Tensor de Deformaciones}} + \underbrace{\frac{1}{2} (\partial_\sigma u_\mu - \partial_\mu u_\sigma)}_{a_{\sigma\mu}}$$

V^R solo puede depender de la parte simétrica $\epsilon_{\sigma\mu}$.

$$V^R = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\sigma, \tau \\ \mu, \nu}} \int d^3 r [\epsilon_{\sigma\mu} + a_{\sigma\mu}] \bar{E}_{\sigma\mu, \tau\nu} [\epsilon_{\tau\nu} + a_{\tau\nu}]$$

\bar{E} debe ser tal que $a_{\sigma\mu} \bar{E}_{\sigma\mu, \tau\nu} a_{\tau\nu} = 0$. En ese caso:

$$V^R = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\sigma, \tau \\ \mu, \nu}} \int d^3 r \epsilon_{\sigma\mu} \bar{E}_{\sigma\mu, \tau\nu} \epsilon_{\tau\nu} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\sigma, \tau \\ \mu, \nu}} \int d^3 r \frac{1}{2} (\epsilon_{\sigma\mu} + \epsilon_{\mu\sigma}) \cdot \bar{E}_{\sigma\mu, \tau\nu} \cdot (\epsilon_{\tau\nu} + \epsilon_{\nu\tau})$$

esto nos da 4 términos:

$$U^L = \frac{1}{2} \int d^3x \frac{1}{4} \left[\sum_{\sigma, \mu} \bar{E}_{\sigma\mu} \sum_{\tau, \nu} \xi_{\tau\nu} + \underbrace{\sum_{\sigma, \mu} \bar{E}_{\sigma\mu} \sum_{\tau, \nu} \xi_{\tau\nu}}_{\text{Pares } \tau \leftrightarrow \nu} + \underbrace{\sum_{\mu, \sigma} \bar{E}_{\sigma\mu} \sum_{\tau, \nu} \xi_{\tau\nu}}_{\text{Pares } \sigma \leftrightarrow \mu} + \underbrace{\sum_{\mu, \sigma} \bar{E}_{\sigma\mu} \sum_{\tau, \nu} \xi_{\tau\nu}}_{\text{Pares } \sigma \leftrightarrow \mu, \tau \leftrightarrow \nu} \right]$$

y puedo juntar todo:

$$U^L = \frac{1}{2} \int d^3x \sum_{\substack{\sigma, \tau \\ \mu, \nu}} \xi_{\sigma\mu} c_{\sigma\mu\tau\nu} \xi_{\tau\nu} \rightarrow \text{estructura simétrica que simplifica el cálculo}$$

con:

$$c_{\sigma\mu\tau\nu} = -\frac{1}{g\nu} \frac{1}{R} \left[R_\sigma D_{\mu\nu}(\vec{R}) R_\tau + R_\mu D_{\sigma\nu}(\vec{R}) R_\tau + R_\sigma D_{\mu\tau}(\vec{R}) R_\nu + R_\mu D_{\sigma\tau}(\vec{R}) R_\nu \right]$$

Esta ecuación, que ahora falta recordar, es interesantísima: tiene propiedades noconmutativas y noasociativas.

Además, se ve que c es invariante ante permutaciones:

- $\sigma \mu \leftrightarrow \tau \nu$
- $\sigma \leftrightarrow \mu$
- $\tau \leftrightarrow \nu$

lo que reduce enormemente el número de componentes independientes de c .

Zimarek

Más restricciones aparecen aún con los componentes.

ECUACIONES DINÁMICAS EN EL LÍMITE CONTINUO

Como antes, vamos a hallarlas en 1D para pasar luego a 3D: (como antes, la deducción que antes es de 1D)

$$U = \frac{1}{2} \int_0^L dx \bar{E} \dot{u}'(x)^2$$

mantenemos los desplazamientos dependientes del tiempo

para hallar las ecuaciones del movimiento necesitamos $T = \frac{1}{2} \sum_n M \dot{u}_i(na)^2 = \frac{1}{2} \int_{\text{límite inferior}}^{\text{límite superior}} M \dot{u}_i(na)^2 da = \left| da = \frac{1}{2} da \right|$

$\frac{1}{2} \int_0^L \left(\frac{M}{a} \right) \dot{u}_i(x)^2 dx$. Escribiendo explícitamente que u depende de t :

$$T = \int_0^L \frac{1}{2} \rho [\dot{u}_i(x,t)]^2 dx \quad (1)$$

por lo que el lagrangiano vale:

$$L = \int \left[\frac{1}{2} \rho \dot{u}(x,t)^2 - \frac{1}{2} \bar{E} u'(x,t)^2 \right] dx \equiv \int L dx \quad (2)$$

tenemos un lagrangiano noconvectivo cuyos parámetros están relacionados con magnitudes microscópicas.

El límite es que hay infinitos grados de libertad que, en el límite continuo, se traduce en que

$$L \neq L(q_i, \dot{q}_i, t)$$

los grados de libertad son funciones: $L = L(u(x,t), u'(x,t), \dot{u}(x,t), t)$

Imponiendo $\delta \int_0^T L dt = 0$ se llega a las siguientes ecuaciones para los densidad lagrangiana L :

$$\frac{\partial L}{\partial u} - \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{u}} \right) - \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial L}{\partial x_i} \right) = 0 \quad \left(\begin{array}{l} \text{lo que afortunadamente} \\ \text{llamamos } \frac{\partial L}{\partial (q, \dot{q}, x)} - \frac{\partial L}{\partial t} = 0 \end{array} \right)$$

lo cual implica (E46)

$$\rho \ddot{u} - \bar{E} u'' = 0 \quad (3)$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \frac{\bar{E}}{\rho} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0 \Rightarrow \text{¡la ecuación de ondas!}$$

$$c = \sqrt{\frac{\bar{E}}{\rho}} = \sqrt{\frac{\gamma a}{\rho/a}} = a \sqrt{\frac{\gamma}{\rho}}, \text{ ¡la velocidad}$$

de una onda noconvectiva

del tipo de una onda noconvectiva

Desde otro punto de vista, si probamos $u(x,t) = e^{i(kx - \omega t)} \quad (4)$

(lo que demuestra probando que ondas viajan con $x = ct$)

$$\omega^2 = \frac{\bar{E}}{\rho} k^2 \quad (5)$$

la relación de dispersión para $k \gg 1/a \Rightarrow \underline{\underline{\lambda \gg a}}$ (lóbulo)

En 3D hay algún índice más:

$$V^L = \frac{1}{2} \int \sum_{\substack{\mu, \nu \\ \sigma, \tau}} \epsilon_{\sigma\mu} c_{\sigma\mu\nu} \epsilon_{\nu\tau} d^3r = \frac{1}{2} \int \sum_{\substack{\mu, \nu \\ \sigma, \tau}} \frac{1}{4} c_{\sigma\mu\nu} (\partial_\sigma u_\mu + \partial_\mu u_\sigma) (\partial_\tau u_\nu + \partial_\nu u_\tau) d^3r$$

$$T = \frac{1}{2} \sum_{R \in R.R.} M \dot{\vec{m}}(\vec{R}, t)^2 \sim \int \frac{1}{2} \left(\frac{M}{V_{cp}} \right) \dot{\vec{m}}(\vec{r}, t)^2 d^3r$$

(con esta, no van
 desde el principio)

$$T = \int \frac{1}{2} \rho \dot{\vec{m}}(\vec{r}, t)^2 d^3r \quad (1)$$

$$L = \int \mathcal{L} d^3r = \int \left[\frac{1}{2} \rho \dot{\vec{m}}(\vec{r}, t)^2 - \frac{1}{8} \sum_{\substack{\mu, \nu \\ \sigma, \tau}} c_{\sigma\mu\nu} (\partial_\sigma u_\mu + \partial_\mu u_\sigma) (\partial_\tau u_\nu + \partial_\nu u_\tau) \right] d^3r \quad (2)$$

de nuevo, los parámetros macroscópicos como parámetros están relacionados con cantidades microscópicas.

Las ecuaciones de Euler-Lagrange llevan a:

$$\rho \ddot{u}_\mu = \sum_{\sigma, \nu, \tau} c_{\mu\sigma\nu\tau} \frac{\partial^2 u_\tau}{\partial x_\sigma \partial x_\nu} \quad (3)$$

La deducción, que no entra, es pelín larga:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_\alpha} = 0$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{u}_\alpha} = \rho \dot{u}_\alpha ; \quad \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{u}_\alpha} \right) = \rho \ddot{u}_\alpha$$

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \rho [\dot{u}_x^2 + \dot{u}_y^2 + \dot{u}_z^2]$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\beta u_\alpha)} = -\frac{1}{8} \sum_{\substack{\mu, \nu \\ \sigma, \tau}} c_{\sigma\mu\nu\tau} \left[(\delta_{\beta\sigma} \delta_{\alpha\mu} + \delta_{\beta\mu} \delta_{\alpha\sigma}) (\partial_\tau u_\nu + \partial_\nu u_\tau) + (\partial_\sigma u_\mu + \partial_\mu u_\sigma) \cdot (\delta_{\beta\tau} \delta_{\alpha\nu} + \delta_{\beta\nu} \delta_{\alpha\tau}) \right] =$$

$$= -\frac{1}{8} \left[\sum_{\nu, \tau} c_{\rho\alpha\tau\nu} (\partial_\tau u_\nu + \partial_\nu u_\tau) + \sum_{\nu, \tau} c_{\alpha\rho\tau\nu} (\partial_\tau u_\nu + \partial_\nu u_\tau) + \sum_{\mu, \sigma} c_{\sigma\rho\mu\alpha} (\partial_\sigma u_\mu + \partial_\mu u_\sigma) + \sum_{\mu, \sigma} c_{\sigma\rho\mu\alpha} (\partial_\sigma u_\mu + \partial_\mu u_\sigma) \right] =$$

$$= -\frac{1}{2} \sum_{\nu, \tau} c_{\rho\alpha\tau\nu} (\partial_\tau u_\nu + \partial_\nu u_\tau) = -\sum_{\nu, \tau, \rho} c_{\rho\alpha\tau\nu} \partial_\tau u_\nu$$

$$\sum_{\rho} \partial_\rho \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\rho u_\alpha)} \right) = -\sum_{\nu, \tau, \rho} c_{\rho\alpha\tau\nu} \frac{\partial^2 u_\nu}{\partial x_\tau \partial x_\rho} = -\sum_{\nu, \tau, \rho} c_{\rho\alpha\tau\nu} \frac{\partial^2 u_\tau}{\partial x_\nu \partial x_\rho}$$

(esto es el tensor de elasticidad)

Resolvido $\alpha \leftrightarrow \mu$
 $\beta \leftrightarrow \sigma$: $\rho \ddot{u}_\mu = \sum_{\nu, \sigma} c_{\mu\sigma\nu} \frac{\partial^2 u_\nu}{\partial x_\sigma \partial x_\nu}$

- Buscamos soluciones armónicas: $\vec{u}(\vec{x}, t) = \vec{\epsilon} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)}$ (4) (EXACTAMENTE igual que en los autovalores)

$$\rho \omega^2 \epsilon_\mu = \sum_{\nu} \underbrace{\left(\sum_{\sigma} c_{\mu\sigma\nu} k_\sigma k_\nu \right)}_{H_{\mu\nu} \text{ (matriz } 3 \times 3)} \epsilon_\nu \quad (5)$$

La emisión de autovalores de una matriz 3×3 . (¡¡¡es el caso difícil!!!)

Igual que en el caso difícil, $H_{\mu\nu} = H_{\mu\nu}(\vec{k}) = \sum_{\sigma, \nu} c_{\mu\sigma\nu} k_\sigma k_\nu$

pero si escribimos $\vec{k} = k \hat{n}_k$, $H_{\mu\nu}(\vec{k}) = k^2 \sum_{\sigma, \nu} c_{\mu\sigma\nu} \hat{n}_{k\sigma} \hat{n}_{k\nu} \equiv k^2 \tilde{H}(\hat{n}_k)$

¡ Exactamente igual que el límite $\lambda \gg a$ del caso difícil! ($\rho \omega^2 = \rho_s(\hat{n}_k) k^2 \Rightarrow$ 3 velocidades del sonido (por polarización) para cada dirección.)

Esto es útil: midiendo la velocidad del sonido para diferentes direcciones se pueden determinar los coeficientes $c_{\mu\sigma\nu}$ y con ellos las constantes de fuerza.

Limatek

SIMETRÍAS DE LA MATRIZ DE FUERZAS

Tanto $D(\vec{R})$ como $D(\vec{k})$ son matrices 3×3 . Son, de hecho, funciones matriciales discretas.

Ya vimos que la simetría de inversión espacial impone una serie de condiciones sobre $D(\vec{R})$.

¿Qué efecto tienen las demás simetrías del sólido? (Trabaja con matrices que se dan particularmente)
→ acción alrededor de eje /

Por simetría entendemos $\left\{ \begin{array}{l} \text{Rotación} \\ \text{Reflexión por ejes} \\ \text{Reflexión por planos} \end{array} \right.$ que vienen representadas por ciertas matrices S.

Notación: C_{ni}^{\pm} → rotación de $\frac{2\pi}{n}$ alrededor del eje i , a dirección \uparrow
 P.ej.: C_{4z}^+ ⇒ giro de 90° alrededor del eje z \rightarrow

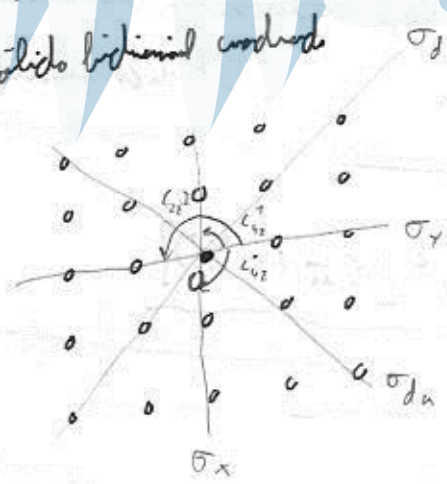
σ_i → reflexión respecto del plano perpendicular al eje i
 P.ej.: σ_x ⇒ reflexión respecto del plano YZ \rightarrow

I → inversión espacial

$S \vec{R} \in R.B. \quad \forall \vec{R} \in R.B.$

(ver intuitivamente a dibujos)

Para un sólido, S es una simetría si
 P.ej.: sólido bidimensional cuadrado



- C_{4z}^+
- $C_{2z} (= I)$
- σ_{d1}
- C_{4z}^-
- σ_x
- σ_{d2}
- σ_y

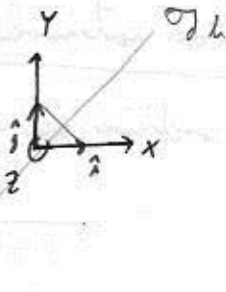
(notar que $C_{2z} = (C_{4z})^2$ no tiene longitudes, pero TODAS las operaciones de simetría)

A cada simetría se le origina una matriz. P.ej., alrededor del eje z rotación $S_\theta = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

Así, $S(C_{4z}^+) = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$, $S(C_{4z}^-) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ y $S(C_{4z}^+ C_{4z}^-) = S(I) = S(E) = S(C_{4z}^+) S(C_{4z}^-) = I$

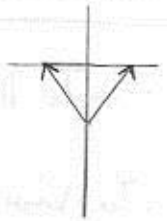
Hay un método mejor: colocando por columnas la imagen de cada vector de la base $\{i, j, k\}$ sale la matriz de transformación.

P.ej.:

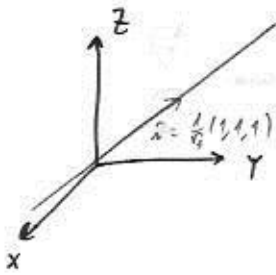


$$S(\sigma_{du}) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

→ recordar luego con yfari:



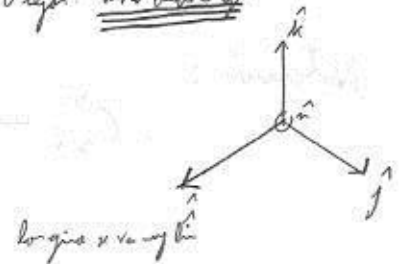
Otro más interesante:



C_{31}^+ → rotación de 120°

$$S(C_{31}^+) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

los ejes horizontales en la mano a la izquierda 3 veces, y de igual
 Oseja: visto desde el eje:



Si el sólido es invariante bajo alguna simetría, su carga armónica (la función a la que aparece D) debe ser invariante bajo dicha simetría:

$$U^R = \frac{1}{2} \sum_{\substack{R_1, R_2 \\ \mu, \nu}} \mu_{\mu}(\vec{R}_1) D_{\mu\nu}(\vec{R}_1 - \vec{R}_2) \mu_{\nu}(\vec{R}_2) = \sum_{\substack{R_1, R_2 \\ \text{Núcleo} \\ \text{real}}}$$

SUTIL Y ESENCIAL
 Si yo transformo mi campo vectorial $\vec{u}(\vec{R})$ bajo cierta simetría del cristal (exp. de simetría $S\vec{u}(S\vec{R})$), U^R debe permanecer invariante (por la vea la demostración, que hay que saber) simetría del sólido, como descripción, en el sólido que yo no giro. son equivalentes: el desplazamiento a un valor de coordenadas, y en el otro a igual por el U^R es mismo)

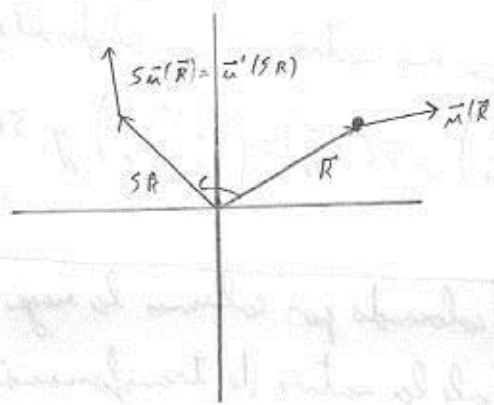
$$U^R [\vec{u}(\vec{R})] = U^R [S\vec{u}(S^{-1}\vec{R})]$$

↓
 El cristal queda IGUAL, como (propiedad de Van Neuman) no es de deformación. esto se puede usar LA MISMA función U^R los mismos D. El mismo desplazamiento del ión que obtenido a la posición $S\vec{R}$.

$$\vec{u}'(S\vec{R}) = S\vec{u}(\vec{R})$$

$$\vec{u}'(\vec{R}) = S\vec{u}(S^{-1}\vec{R})$$

$$\vec{u}(\vec{R}) \rightarrow S\vec{u}(S^{-1}\vec{R})$$



El mismo desplazamiento del ión que obtenido a la posición \vec{R}

hipótesis invariante de U^2 . Como $\vec{u}^T(\vec{R})^T = [S \vec{u}^T (S^{-1} \vec{R})]^T = \vec{u}^T (S^{-1} \vec{R}) S^{-1}$:
 $S^T = S^{-1}$

$$\frac{1}{2} \sum_{\vec{R}_1, \vec{R}_2} \vec{u}^T(\vec{R}_1) D(\vec{R}_1 - \vec{R}_2) \vec{u}(\vec{R}_2) = \frac{1}{2} \sum_{\vec{R}_1, \vec{R}_2} \vec{u}^T (S^{-1} \vec{R}_1) S^{-1} D(\vec{R}_1 - \vec{R}_2) S \vec{u} (S^{-1} \vec{R}_2) =$$

$$\stackrel{j}{=} \left| \begin{array}{l} S^{-1} \vec{R}_1 \equiv \vec{R}'_1 \\ S^{-1} \vec{R}_2 \equiv \vec{R}'_2 \end{array} \right| \cdot \frac{1}{2} \sum_{\vec{R}'_1, \vec{R}'_2} \vec{u}^T(\vec{R}'_1) S^{-1} D(S(\vec{R}'_1 - \vec{R}'_2)) S \vec{u}(\vec{R}'_2)$$

Hoyo cali de variables por poder comparar

Como S es invertible
 with P.B. que se invierte
 \downarrow
 Inversión de signo

Como las variables de sumación son sueltas y la igualdad $\forall \vec{u}(\vec{R})$: (entiéndese que dos formas cuadráticas sea iguales \Leftrightarrow en otras variables son iguales)

$$D(\vec{R}) = S^{-1} D(S\vec{R}) S$$

\Downarrow Multiply by S^{-1} on both sides
 P^{-1} inv. on S^{-1}

$$S D(\vec{R}) S^{-1} = D(S\vec{R})$$

\Rightarrow Esto se está diciendo que el caso rotacional $D(\vec{R})$ no puede ser arbitrario.



Lo mismo a \vec{R}' está ligado con lo mismo a \vec{R} por una transformación de rotación

¿Cómo se traduce esto a $D(\vec{k}) = \sum_{\vec{R}} D(\vec{R}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}}$?

Uy, digite: D(R) por $\vec{k} \cdot \vec{R}$?

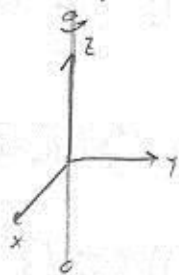
Resultado que debe cumplirse:

$$D(S\vec{k}) = S D(\vec{k}) S^{-1}$$

(P.B. y E.P. requiere otros parámetros, el caso E.P. depende a partir de P.B., es otro asunto que se invierte tal vez que se invierte E.P.)

esto va a implicar relaciones entre los $\epsilon_S(\vec{k})$ y \vec{k} .

Ejemplo: cristal tridimensional en un eje binario (la ley, la pérdida de igualdad, y dirección z)

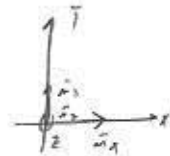


C_{22}

$D(s\vec{k}) = S D(\vec{k}) S^{-1}$ no se iguala logarismo solo $D(\vec{k})$ para \vec{k} fijo, en que se salvan no \vec{k} por otro.

SALVO en $S \vec{k} = \vec{k} \Rightarrow$ por eso el sonido está convenientemente polarizado para propagarse según ejes con especial simetría

Tomamos tanto $\vec{k} = k \hat{z}$, $\text{Cov } S(C_{22}) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$



salvo, como $S^T = S$, $S = S^{-1}$:

Sea $D(\vec{k}) = \begin{pmatrix} a & d & e \\ d & b & f \\ e & f & c \end{pmatrix}$

Delimita: $\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & d & e \\ d & b & f \\ e & f & c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & d & e \\ d & b & f \\ e & f & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

$D(\vec{k}) = S D(\vec{k}) S^{-1}$

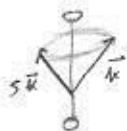
$D S = S D$ - en el de fijos (S cuenta con) por ser un sitio

Esto implica: $\begin{cases} e=0 \\ f=0 \end{cases} \Rightarrow D = \begin{pmatrix} a & d & 0 \\ d & b & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix} \rightarrow$ diagonalizables solo $\frac{\omega}{v}$

Es decir, si una onda se propaga según la dirección de un eje binario:

- Una polarización es longitudinal
- Dos polarizaciones son transversales

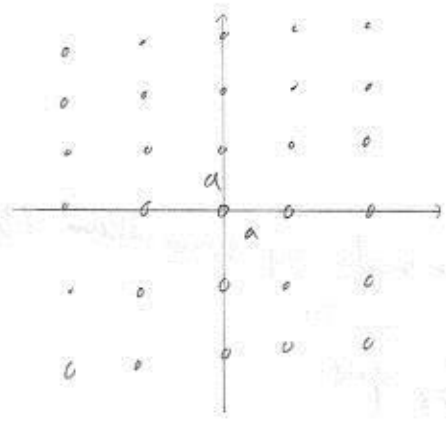
En la ordenación de una dirección, la información es útil:



\Rightarrow Como $D(\vec{k})$ y $D(s\vec{k})$ están relacionados por la transformación de rotación, sus espectros son iguales

La frecuencia para \vec{k} y $s\vec{k}$ son iguales

Ejemplo 2: comportamiento de la matriz de potencial de una red cuadrada con interacción a vecinos próximos y vibraciones bidimensionales



$D(\vec{R}) = \begin{pmatrix} a(\vec{R}) & c(\vec{R}) \\ c(\vec{R}) & b(\vec{R}) \end{pmatrix}$. Los otros a primeros vecinos, $D(\vec{R})$ va a ser $\neq 0$ solo para:

$D(0,0)$
 $D(0,1) = D(0,\bar{1})$
 $D(1,0) = D(\bar{1},0)$

} Solo son porque de 3 matrices

(a segundos vecinos se incluyen)

$D(1,1) = D(\bar{1},\bar{1})$
 $D(1,\bar{1}) = D(\bar{1},1)$

Deberas considerar:

C_{4z}^+	σ_x	σ_{dx}	
C_{2z}	σ_y	σ_{dy}	

\Rightarrow a los C_{4z}^+ se les va a aplicar σ_x y σ_y en vez de σ_z

F. de una red 2D
 plano cuadrado
 (no de los lados
 a clar)

- Nos va a restringir $D(0,0)$
- Nos va a relacionar las otras

Al fin:

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

$S \cdot D(0,0) = \begin{pmatrix} a & c \\ d & b \end{pmatrix}$; (para el S^{-1} al otro lado)

$S^{-1} = S^* = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$

$\begin{pmatrix} a & c \\ d & b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & c \\ b & d \end{pmatrix}$

$a=b$
 $c=0 \Rightarrow D(0,0) = \begin{pmatrix} A & 0 \\ 0 & A \end{pmatrix} = A \mathbb{1} \Rightarrow$ ESTO YA SATISFACE TODAS LAS SIMETRÍAS
 $(D(0)) = S D(0) S^{-1}$ por la identidad \Rightarrow las
 desiciones ya van bien.

Seguimos: $D(1,0) = \begin{pmatrix} a & c \\ c & b \end{pmatrix}$

C_{4z}^{π} no nos dice nada pq. no nos lleva $(1,0)$ a $(1,0)$. Podríamos pensar en
 llevar $(1,0)$ a $(-1,0)$
 $(C_{4z}^{\pi})^2 = C_{2z}$ pero

$C_{2z} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = -\mathbb{1} \Rightarrow$ las matrices proporcionales a la identidad
 no nos dan ninguna información porque siempre
 conmutan.

Ideo para $\sigma_x, \sigma_{da}, \sigma_{de}$

$\sigma_y = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ y dejar $(1,0)$ invariante

$$\begin{pmatrix} a & c \\ c & b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & c \\ c & b \end{pmatrix}$$

\Downarrow

$c=0$

$D(1,0) = D(-1,0) = \begin{pmatrix} B & 0 \\ 0 & C \end{pmatrix}$

Para $D(0,1)$ podríamos usar σ_x o bien usar C_{4z}^{π} con $D(1,0)$ Usar σ_{da} o σ_{de} en vez de σ_x , la misma con
desiciones

$$\begin{aligned}
 D(0,1) &= C_{4z}^{\pi} D(1,0) (C_{4z}^{\pi})^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B & 0 \\ 0 & C \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} a & -c \\ B & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C & 0 \\ 0 & B \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

(ya podria usar σ_{de} , queda lo mismo)

Los puntos esenciales

Esto es interesante porque reduce el número de parámetros a hallar experimentalmente para determinar las D.

Es más, se nos ha olvidado imponer $\sum_{\vec{R}} D(\vec{R}) = 0$ (una de las condiciones de los traducciones de toda la P.P. de V^h invariante)

$$\begin{pmatrix} A & 0 \\ 0 & A \end{pmatrix} + 2 \begin{pmatrix} B & 0 \\ 0 & C \end{pmatrix} + 2 \begin{pmatrix} C & 0 \\ 0 & B \end{pmatrix} = 0$$

$$A + 2B + 2C = 0$$

\Rightarrow Nos quedan de ^{5 matrices 2×2} 15 parámetros independientes a 2, formando un sistema que sea la interacción



Zimatek

MODELO CUÁNTICO DEL CRISTAL

ARMÓNICO

- El objetivo de este capítulo será estudiar la termodinámica de las vibraciones iónicas.
- Sabemos que la contribución electrónica al calor específico es $\propto T$. Estudiamos la contribución iónica.

A priori el Hamiltoniano del sistema es enredado. Sin embargo, si pensamos a las coordenadas normales como de dN osciladores acoplados a dN osciladores desacoplados. (docho por las coordenadas normales)

- Por tanto, el espectro del Hamiltoniano es trivial: (el espectro de los osciladores desacoplados)

$$E = \sum_{\vec{k}, s} \left(n_{\vec{k}, s} + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_{\vec{k}, s}$$

\vec{k}, s
↓
Modo normal (oscilador)
N de osciladores

donde $n_{\vec{k}, s}$ es el nivel en el que se encuentra el modo normal $\vec{k}, s \Leftrightarrow$ el nivel de excitación de ese modo normal.

MODOS NORMALES VS FONONES

- Como vemos, la energía de cada modo normal es proporcional a $\hbar \omega_{\vec{k}, s}$. Por tanto, si miramos un cristal de forma no tan ingenua como puede parecer, es como si la energía vibracional fuera una contribución de cuantos de energía que llamamos fonones. $n_{\vec{k}, s}$ es, por tanto, el número de fonones con frecuencia $\omega_{\vec{k}, s}$.
- Además, en un cristal, los modos normales transportan momento lineal $\hbar \vec{k}$. Por tanto, como los cuantos de energía llevan momento lineal, les queda llamar partículas.
- Es una descripción dual: es lo mismo hablar del número de excitación de cada modo normal que hablar del número de fonones.

Lo mismo ocurre con el campo electromagnético o, en teoría cuántica de campos, con cualquier campo: al cuantizar aparecen osciladores armónicos que, al tener el espectro equiespaciado, se puede entender como una contribución de n cuantos de energía que, como tiene sentido físico, llamemos partículas.

CALOR ESPECÍFICO

Como la energía es suma de contribuciones independientes (la energía de cada fonón no depende del resto), la función de partición factoriza.

Para cada modo normal (para cada clase de fonón):

$$Z = \sum_n e^{-\beta \hbar (n + \frac{1}{2}) \omega_s(\vec{k})}$$

$$E = \left(\frac{1}{e^{\beta \hbar \omega} - 1} + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega = \left(\langle n \rangle + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega$$

\downarrow
 $E = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega, \langle E \rangle = E = (\langle n \rangle + \frac{1}{2}) \hbar \omega$

es decir, $\langle n \rangle = \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega} - 1}$: el número medio de fonones sigue la distribución de

Planck (lo cual es lógico, pues es una partícula cuántica no conservada y bosónica)

Al menos lo típico, cuanto $E \ll \hbar \omega$, sí se le da de proporcionalidad el número de cuantos (o el número de fonones)

Puede haber un par de los mismos fonones

Por tanto, la energía interna de un cristal vale ($Z = \prod_i Z_i \Rightarrow U = \sum_i E_i$)

$$U = U^{eq} + \sum_{\vec{k}, s} \frac{1}{2} \hbar \omega_s(\vec{k}) + \sum_{\vec{k}, s} \frac{\hbar \omega_s(\vec{k})}{e^{\beta \hbar \omega_s(\vec{k})} - 1}$$

$U = U^{eq} + U^{vib}$
No depende de la posición del cristal, $m > 0$ no depende estadístico

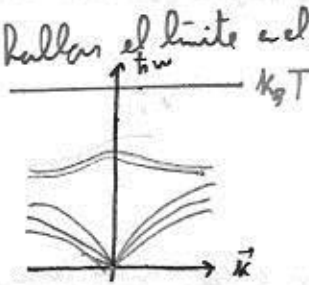
Por lo que el calor específico vale:

$$c_v = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}, s} \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{\hbar \omega_s(\vec{k})}{e^{\beta \hbar \omega_s(\vec{k})} - 1} \right)$$

LÍMITE DE ALTAS TEMPERATURAS

El problema es que la fórmula recién obtenida para c_v no es fácilmente evaluable.

Vamos a hallar el límite a el que



$$T \gg \frac{k_B}{h \nu_s(\vec{k})}$$

para todas las ramas de la relación de dispersión \rightarrow presencia de TODAS las unidades de espín

o sea, $\beta h \nu_s(\vec{k})$ es pequeño y la exponencial se puede desarrollar en serie:

$$\frac{1}{e^x - 1} = \frac{1}{x + \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{6}x^3 + \dots} = \frac{1}{x} \cdot \frac{1}{1 + \frac{1}{2}x + \frac{1}{6}x^2 + \dots} = \frac{1}{x} \cdot \left[1 - \frac{1}{2}x + \frac{1}{12}x^2 + O(x^3) \right]$$

$(1+x)^{-1} = 1 - x + \frac{1}{2}x^2 - \dots$

Tenemos diferentes contribuciones a U y, o sea, al calor específico:

$$c_v = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}, s} \frac{2}{2T} \left(\frac{h \nu_s(\vec{k})}{h \nu_s(\vec{k})} \cdot \frac{k_B T}{h \nu_s(\vec{k})} \right) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}, s} k_B = \frac{3N}{V} k_B + k_B = \frac{3(N_f)}{V} k_B \quad \begin{matrix} \text{Si hay } p \text{ iones por celda,} \\ \text{Entonces } N_{\text{vibr}} = 3p \\ \text{(hay } 3N_f \text{ grados de libertad)} \end{matrix}$$

$5.96 \frac{\text{cal}}{\text{mol K}}$
iones por celda de cristal

es la famosa Ley de Dulong-Petit se deduce del teorema de equipartición: cada grado de libertad cuadrático en H contribuye con $\frac{1}{2} k_B$ a la capacidad calorífica. Como hay $3N_f$ osciladores desacoplados y cada oscilador tiene dos grados de libertad cuadráticos ($H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$), $C_v = 3N_f k_B$.

Esto no es más que el límite clásico.

El siguiente término, al no depender de x , no depende de T y no contribuye a c_v .

La primera corrección cuántica a altas temperaturas resulta ser $-\frac{h^2}{12V k_B T^2} \sum w_s(\vec{k})^2$

Esta corrección es puramente académica, para temperaturas suficientemente altas como para que todo esto sea válido el cristal ya ha fundido. (Dulong-Petit se observa como un límite)

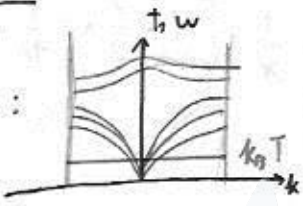
La segunda corrección es $\frac{1}{T^3}$

LÍMITE DE BAJAS TEMPERATURAS

A bajas temperaturas, uno podría pensar que β es grande, por lo que se puede cargar el 1 y tengo $\frac{\partial}{\partial T} \frac{\hbar \omega}{e^{\beta \hbar \omega}} = \frac{\partial}{\partial T} \hbar \omega e^{-\beta \hbar \omega}$, y como la derivada de una exponencial es otra exponencial el calor específico irá a 0 exponencialmente.

Pero es que el experimento dice que va a 0 como T^3 .

El problema es que la temperatura debe ser baja comparada con algo; en este caso, con $\frac{\hbar \omega_s}{k_B T}$ para todas las ramas. ¡pero es que las ramas acústicas tienen frecuencias arbitrariamente pequeñas!

Gráficamente:  \Rightarrow nunca estaré en el régimen de bajas temperaturas para todas las oscilaciones \Rightarrow no puedo tomar tan adelante $e^{\beta \hbar \omega} \gg 1$

Hay que atacar el problema de otra forma. Para esas cosas como \vec{k} es muy denso, puedo convertir la suma a integral: (recuerda: hay $\frac{V}{(2\pi)^3}$ d^3k estados por vol. de vol. en el espacio de \vec{k})

$$C_V = \frac{\partial}{\partial T} \sum_s \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\hbar \omega_s(\vec{k})}{e^{\frac{\hbar \omega_s(\vec{k})}{k_B T}} - 1} \quad \left(\sum_{\vec{k}} = \sum_n \approx \int d^3k = \left| \frac{N \cdot k_x \cdot l_x}{2\pi} \cdot \frac{N \cdot k_y \cdot l_y}{2\pi} \cdot \frac{N \cdot k_z \cdot l_z}{2\pi} \right| = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k \right)$$

Aquí se pueden hacer 3 aproximaciones: (ojo, tienen sus órdenes)

① $s \in \{1, 2, 3\}$: olvida los modos ópticos

Como de la transmisión de luz, los modos ópticos sufren un modo blando, se van y contribuyen al calor específico

(como se ve en la figura, a T bajas estar por debajo de todos los modos ópticos, así que para estos $e^{\beta \hbar \omega}$ es enorme, el integrando es muy pequeño y sus contribuciones al sumando están exponencialmente suprimidas)

② $\omega_s(\vec{k}) = c_s(\vec{k}) |\vec{k}|$

(como solo están en las ramas acústicas y el integrando solo es apreciable para ω pequeñas, pero si no está exponencialmente suprimido, puedo sustituir el comportamiento de las ramas por el límite lineal: a la región a la que esta aproximación es válida, el integrando no contribuye)

③ Extiende la integral a todo el espacio

(porque el integrando solo es $\neq 0$ en una pequeña región alrededor del origen)

$\frac{1}{2} \log \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$
no tengo dudas a
buenas

Con estas aproximaciones, se llega a: (E52)

$$\epsilon_v = \frac{2}{\partial T} \frac{(k_B T)^4}{(\hbar c)^3} \frac{3}{2\pi^2} \int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1}$$

con $\frac{1}{c^3}$ un promedio de (las velocidades del sonido):

$$\frac{1}{c^3} = \frac{1}{3} \sum_i \left[\frac{d\Omega}{4\pi} \frac{1}{c_i(k)^3} \right]$$

Promedio sobre orientaciones

La integral está tabulada:

$$\epsilon_v = \frac{2\pi^2}{5} k_B \left(\frac{k_B T}{\hbar c} \right)^3 \quad (\propto T^3)$$

que coincide extraordinariamente bien con los datos experimentales.

Como se ha visto, este vale para T suficientemente pequeñas, i.e. $k_B T$ está por debajo de todas las ramas ópticas y en la región lineal de las acústicas.

MODELO DE DEBYE

Es un modelo que se usa para interpolar las curvas a temperaturas intermedias, con alguna expresión analítica. Está basado en las siguientes hipótesis: (no aproximaciones, hipótesis = a definir términos)

- Sabemos que un sólido transmite sonido: $w = c|k|$. Tomar 3 ramas con la misma c . (no es preciso)
- Integremos hasta cierto k_D , lo suficientemente grande como para tener los suficientes grados de libertad para describir un cristal.

(algunos usan una relación de dispersión "precisa" que incluye también las ramas ópticas y, en consecuencia, los de estados de energía de integración más allá de 1^{-2} . B.)

Sabiendo lo que sabemos, no es difícil estimar un k_D realista: como hay $3N_p$ grados de libertad, debe tener $3N_p = 3N$, con N el número de valores de k permitidos. Con el valor en el espacio de las

k por cada vector de onda, $\frac{(2\pi)^3}{V}$, debe tener $\frac{(2\pi)^3}{V} N = \frac{4}{3} \pi k_D^3 \Rightarrow \frac{N_p}{V} = \frac{k_D^3}{6\pi^2}$

≠ de una por cada val. de k

Bajo estas hipótesis: Hay 3 modos (3 polarizaciones posibles del sonido)

$$C_V = \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{3}{2} \frac{hc}{2\pi^2} \int_0^{k_D} \frac{k^3 dk}{e^{\beta^5 c k} - 1} \right)$$

Se suele definir $\omega_D = k_D c$

$$k_B \Theta_D = \hbar \omega_D = \hbar c k_D$$

- k_D da una idea del espacio de momentos (para $\propto V^{-3}$)
- ω_D es la frecuencia máxima de los fonones EN EL MODELO DE DEBYE
- Θ_D da una idea acerca de si el régimen es de altas o bajas temperaturas (para luego se llega hasta Θ_D/T)

y con el cambio de variable $\frac{\hbar c k}{k_B T} = x$:

$$C_V = 9 n k_B \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3 \int_0^{\Theta_D/T} \frac{x^4 e^x dx}{(e^x - 1)^2}$$

Hay un parámetro Θ_D en función del cual se suelen parametrizar las curvas experimentales.

Otra alternativa es, con el límite de bajas temperaturas: (la integral va a 0)

$$C_V = \frac{12\pi^4}{5} n k_B \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3$$

aproximando Θ_D haciéndolo coincidir con el límite hallado rigurosamente. (al final equivale a poner k_D hallado

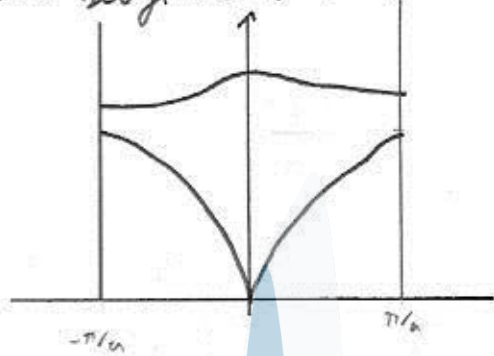
antes y ponerla constante para ser c)

$$\Theta_D \sim T_{AKI}$$

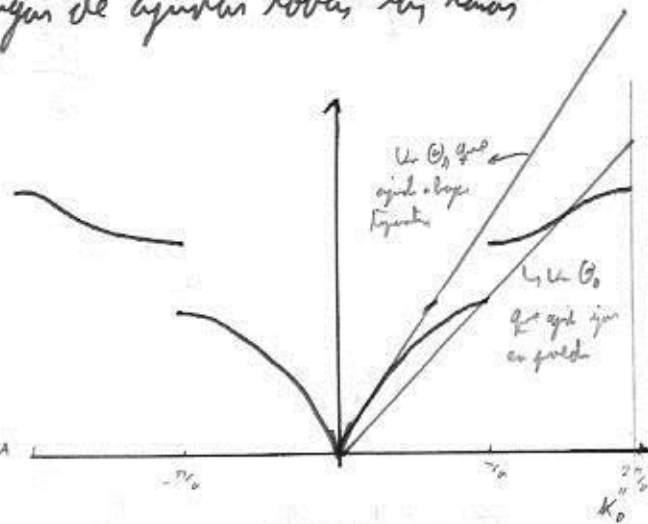
MODELO DE EINSTEIN

- La idea de Einstein fue que cada ión vibra alrededor de su posición de equilibrio independientemente de todos los demás (una especie de tight-binding para fonones) a frecuencia ω_E .
- Aún, como ya has visto, se llega a Dulong-Petit a altas temperaturas y se tiene una caída exponencial a bajas temperaturas.
- Normalmente se suele emplear un modelo mixto: a lugar de ajustar todas las ramas

mediante Debye extendiendo 1º ZB:



→
 • El ajuste a frecuencias ω_E
 de k se hace normal
 • Si están tan normalizadas que a grande escala



Si hay n modos ópticos, sea a haber una contribución a la energía interna de:

$$U = \underbrace{n \cdot N}_{\substack{\# \text{ de } \omega_E \\ \text{ ópticos}}} \frac{\hbar \omega_E}{e^{\beta \hbar \omega_E} - 1}$$

$$C_V = n n k_B \frac{(\hbar \omega_E / k_B T)^2 e^{\frac{\hbar \omega_E}{k_B T}}}{(e^{\frac{\hbar \omega_E}{k_B T}} - 1)^2}$$

Como en total hay $f \cdot d$ ramas, de las cuales d son acústicas y $(f-1)$ ópticas, se suele fitting

Las curvas experimentales como una suma de Einstein y Debye, dándole un peso 1 a la de Debye y un peso $(f-1)$ a la de Einstein. (esta contribución será, salvo baja T que será exponencial)

COMPARACIÓN DE LOS CALORES ESPECÍFICOS

A bajas temperaturas, la contribución fonónica al calor específico es:

$$\frac{12 \pi^4}{5} n_{\text{ion}} k_B \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3$$

mientras que la electrónica:

$$\frac{\pi^2}{2} n_{\text{el.}} k_B \frac{T}{T_F}$$

$$T_F \sim 10^4 \text{ K}$$

$E_F = k_B T_F$ E_F se halla igual

$$N = 2 \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}} = 2 \int_0^{k_F} d^3k = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F} d^3k$$

$$n_i = L_i \frac{k_i}{2\pi}$$

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$$

El cociente vale:

$$\frac{c_v^{\text{el}}}{c_v^{\text{fon}}} = \frac{5}{24\pi^2} \left(\frac{Z}{T^2 T_F} \right) \left(\frac{\Theta_D}{T} \right)^3$$

Valor unit (# e⁻ por ion)

Zimabatek

$$c_v^{\text{el}} > c_v^{\text{fon.}} \text{ cuando } T < T_0 = 0.145 \left(\frac{Z \Theta_D}{T_F} \right)^{1/2} \Theta_D$$

Como $\Theta_D \sim 300 \text{ K}$
 $T_F \sim 10^4 \text{ K}$

$\rightarrow T_0 \sim \text{K} \Rightarrow$ hacen falta muy bajas temperaturas para observar la contribución electrónica

FOTONES VS FONONES

Existe una interesante comparación entre ambos, cuando ambos de la suerte de la física clásica.

	FONONES	FOTONES
# de modos	3 p. para cada \vec{k} $\omega = \omega_s(\vec{k})$	2 para cada \vec{k} $\omega = c k$
\vec{k}	$\vec{k} \in 1^{\text{o}} \text{Z.B.}$ cuantizado	Arbitrario
Densidad de energía térmica	$\sum_s \int_{\text{Z.B.}} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\hbar \omega_s(\vec{k})}{e^{\beta \hbar \omega_s(\vec{k})} - 1}$	$2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\hbar c k}{e^{\beta \hbar c k} - 1}$ <small>La \hbar viene de que es función arbitraria $Z = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta \hbar \omega}$ y al pasar $\omega = c k$, salen $\frac{1}{(2\pi)^3}$</small>

Veros por tanto que la energía térmica de un cuerpo negro guarda muchas similitudes con el modelo de Debye, salvo:

- Un factor $\frac{2}{3}$ (elimina la onda acústica longitudinal)

- $c = c_{\text{ms}}$

- $k_D \rightarrow \infty$

De hecho las fórmulas del cuerpo negro son las del límite de bajas temperaturas de un sólido salvo un factor $2/3$; pues ahí las aproximaciones de bajas temperaturas son exactas.