

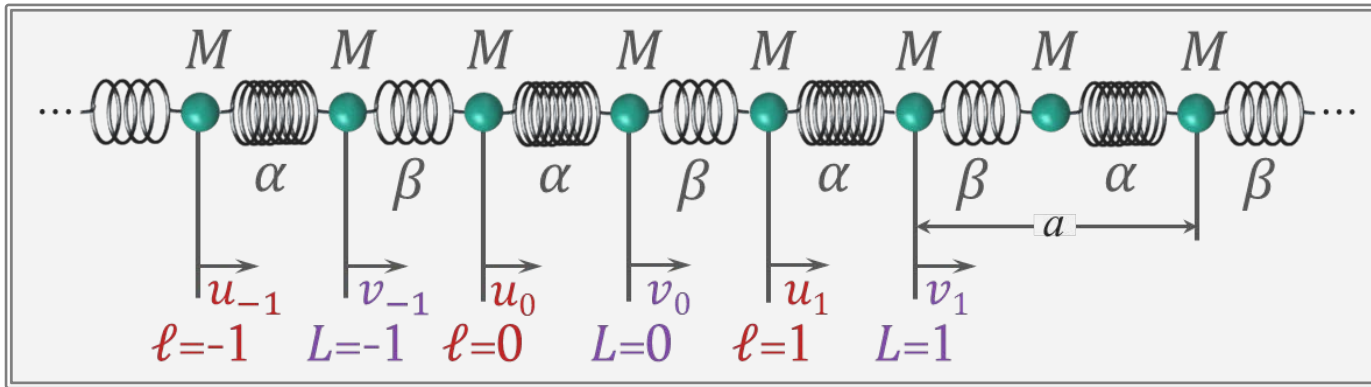
Introdução à Física do Estado Sólido

Lucy V. C. Assali

2018

Cadeia Diatômica:

Constantes de mola diferentes e mesma massa



Para este sistema, teremos as seguintes equações de movimento:

$$M \frac{d^2 u_0}{dt^2} = \alpha [v_0 - u_0] + \beta [v_1 - u_0]$$

$$M \frac{d^2 v_0}{dt^2} = \alpha [u_{-1} - v_0] + \beta [u_0 - v_0]$$

$$u_\ell(x, t) = e^{i(kx - \omega t)} e^{ik\ell a}$$

deslocamentos dos
átomos nas posições ℓ

$$v_L(x, t) = e^{i(kx - \omega t)} e^{ikLa}$$

deslocamentos dos
átomos nas posições L

Cadeia Diatômica (M, α, β)

$$\Rightarrow \begin{cases} M(-\omega^2)u_0 = \alpha [v_0 - u_0] + \beta [v_0 e^{ika} - u_0] \\ M(-\omega^2)v_0 = \beta [u_0 e^{-ika} - v_0] + \alpha [u_0 - v_0] \end{cases}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} -M\omega^2 u_0 + u_0 [\alpha + \beta] - v_0 [\alpha + \beta e^{ika}] = 0 \\ -M\omega^2 v_0 + v_0 [\alpha + \beta] - u_0 [\alpha + \beta e^{-ika}] = 0 \end{cases}$$

$$\begin{bmatrix} -M\omega^2 + (\alpha + \beta) & -(\alpha + \beta e^{ika}) \\ -(\alpha + \beta e^{-ika}) & -M\omega^2 + (\alpha + \beta) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_0 \\ v_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

↓ solução não trivial

$$\det \begin{vmatrix} -M\omega^2 + (\alpha + \beta) & -(\alpha + \beta e^{ika}) \\ -(\alpha + \beta e^{-ika}) & -M\omega^2 + (\alpha + \beta) \end{vmatrix} = 0$$

Cadeia Diatômica (M, α, β)

Resolvendo o determinante:

$$\underbrace{[-M\omega^2 + (\alpha + \beta)]^2}_{M^2\omega^4 + (\alpha + \beta)^2 - 2M\omega^2(\alpha + \beta)} - (\alpha + \beta e^{ika})(\alpha + \beta e^{-ika}) = 0$$

$$M^2\omega^4 + (\alpha + \beta)^2 - 2M\omega^2(\alpha + \beta) - \alpha^2 - \beta^2 - \alpha\beta \left[\underbrace{\frac{e^{ika} + e^{-ika}}{\cos(ka)}}_{1 - 2\sin^2(ka/2)} \right] = 0$$

$\Rightarrow$ A equação a ser resolvida é:

$$\omega^4 - 2 \left(\frac{\alpha + \beta}{M} \right) \omega^2 + 4 \left(\frac{\alpha\beta}{M^2} \right) \sin^2(ka/2) = 0$$

$$\text{Cujas raízes são: } \omega^2 = \frac{(\alpha + \beta)}{M} \pm \frac{1}{2} \sqrt{4 \frac{(\alpha + \beta)^2}{M^2} - \frac{16\alpha\beta}{M^2} \sin^2(ka/2)}$$

Cadeia Diatômica (M, α, β)

Definindo $s = 1$ ou $s = 2$, temos:

$$\omega_s^2 = \frac{(\alpha + \beta)}{M} + \frac{(-1)^s}{2M} \sqrt{4(\alpha + \beta)^2 - 16\alpha\beta \sin^2(ka/2)}$$

$$\omega_s^2 = \frac{(\alpha + \beta)}{M} + \frac{(-1)^s}{M} \sqrt{\alpha^2 + \beta^2 + 2\alpha\beta \cos(ka)}$$

possíveis soluções para
a relação de dispersão
 $\omega(k)$ da onda

Para verificarmos a forma da função $\omega(k) \times k$, vamos examinar as soluções nos limites da 1ª ZB: $k \rightarrow 0$ e $k = \pm \frac{\pi}{a}$:

Cadeia Diatômica (M, α, β)

1. $ka \ll 1$ ou $k \rightarrow 0$ ou $\lambda \gg a$

$$\cos(ka) \approx 1 - \frac{(ka)^2}{2}$$

$$\begin{aligned} s = 1 \quad \Rightarrow \quad \omega_-^2 &= \frac{(\alpha + \beta)}{M} - \frac{1}{M} \sqrt{\alpha^2 + \beta^2 + 2\alpha\beta - \alpha\beta k^2 a^2} \\ &= \frac{(\alpha + \beta)}{M} - \frac{1}{M} \sqrt{(\alpha + \beta)^2 - \alpha\beta k^2 a^2} \\ &= \frac{(\alpha + \beta)}{M} - \frac{(\alpha + \beta)}{M} \sqrt{1 - \frac{\alpha\beta}{(\alpha + \beta)^2} k^2 a^2} \end{aligned}$$

$ka \ll 1$

Como $ka \ll 1$, vamos expandir a raiz em série de Taylor, pois para $x \ll 1$ temos que

$$[1 - x]^{1/2} \approx 1 - \frac{1}{2}x \Rightarrow \sqrt{1 - \frac{\alpha\beta}{(\alpha + \beta)^2} k^2 a^2} \approx 1 - \frac{\alpha\beta}{2(\alpha + \beta)^2} k^2 a^2$$

Cadeia Diatômica (M, α, β)

$$\omega_-^2 = \frac{(\alpha + \beta)}{M} - \frac{(\alpha + \beta)}{M} \left[1 - \frac{\alpha\beta}{2(\alpha + \beta)^2} k^2 a^2 \right]$$

$$= \frac{(\alpha\beta)}{2M(\alpha + \beta)} k^2 a^2 \rightarrow$$

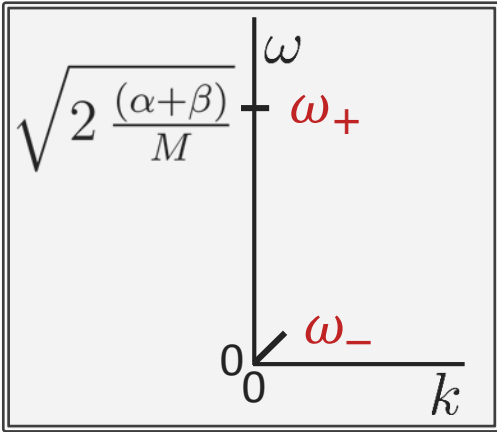
$$\omega_- = \sqrt{\frac{(\alpha\beta)}{2M(\alpha + \beta)}} ka \quad (\omega_- \propto k)$$

$$s = 2 \Rightarrow \omega_+^2 = \frac{(\alpha + \beta)}{M} + \frac{1}{M} (\alpha + \beta) = 2 \frac{(\alpha + \beta)}{M}$$



$$\omega_+ = \sqrt{2 \frac{(\alpha + \beta)}{M}} \quad (\omega_+ \text{ independe de } k)$$

Cadeia Diatômica (M, α, β)

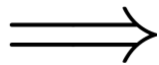


← relação de dispersão, no limite $ka \ll 1$

2. $k = \pm\pi/a$ ou $ka = \pm\pi$

Nesse caso: $\cos(ka) = 0$ e temos

$$\omega_s^2 = \frac{(\alpha + \beta)}{M} + \frac{(-1)^s}{M} \sqrt{\alpha^2 + \beta^2 - 2\alpha\beta}$$



$$\omega_s^2 = \frac{(\alpha + \beta)}{M} + (-1)^s \frac{(\alpha - \beta)}{M}$$

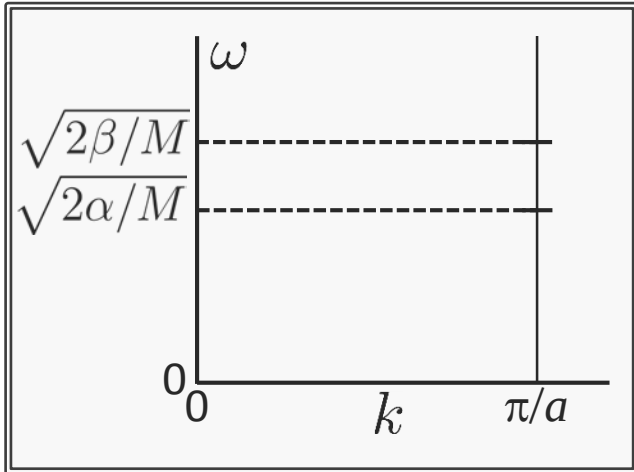
Cadeia Diatômica (M, α, β)

$$s = 1 \Rightarrow \omega_+^2 = \frac{\alpha + \beta - \alpha + \beta}{M} \Rightarrow$$

$$\omega_+ = \sqrt{\frac{2\beta}{M}}$$

$$s = 2 \Rightarrow \omega_-^2 = \frac{\alpha + \beta + \alpha - \beta}{M} \Rightarrow$$

$$\omega_- = \sqrt{\frac{2\alpha}{M}}$$

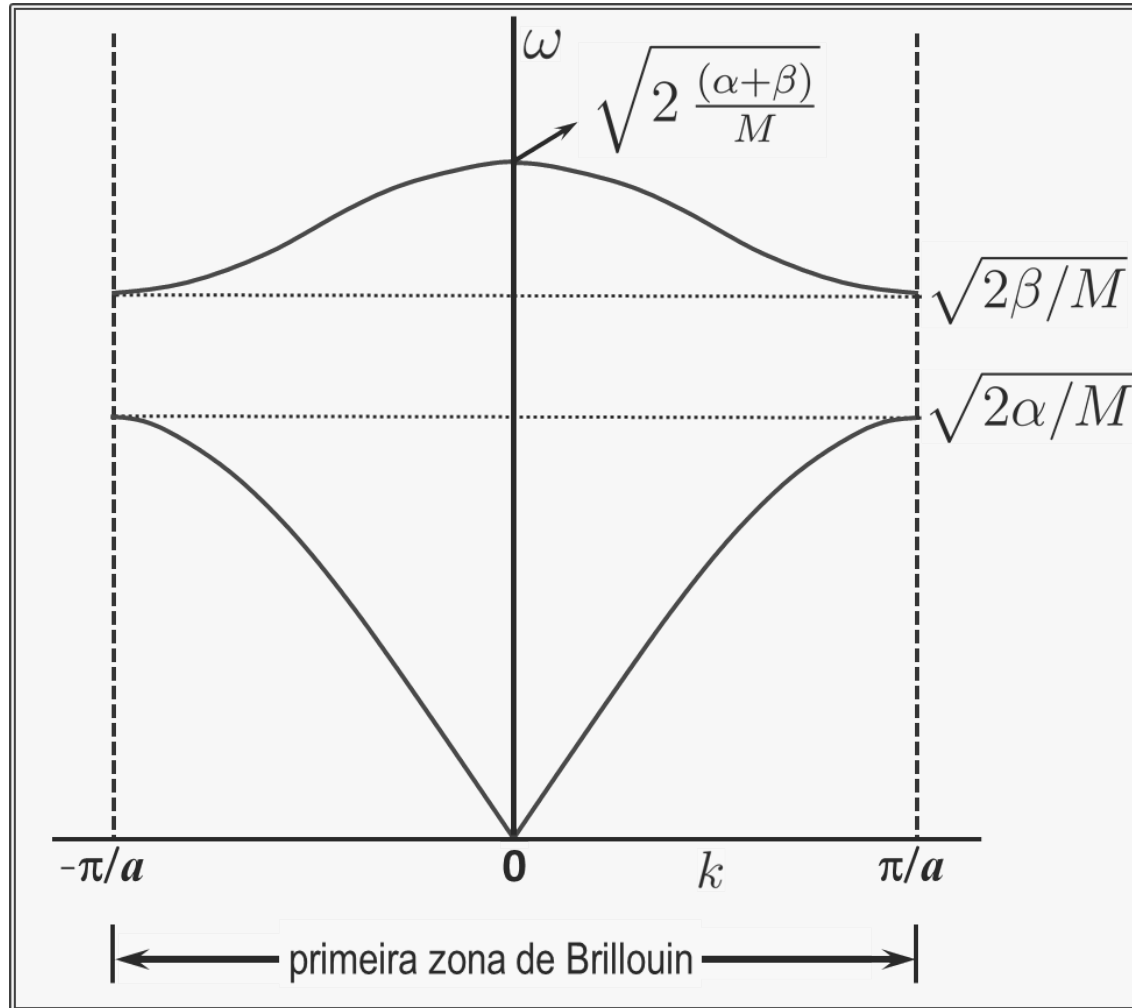


← relação de dispersão para $k = \pm\pi/a$
supondo $\beta > \alpha$

Utilizando os resultados obtidos para $k \rightarrow 0$ e $k = \pm\pi/a$, podemos fazer o gráfico da relação de dispersão para a cadeia diatômica, supondo $\beta > \alpha$

Cadeia Diatômica (M, α, β)

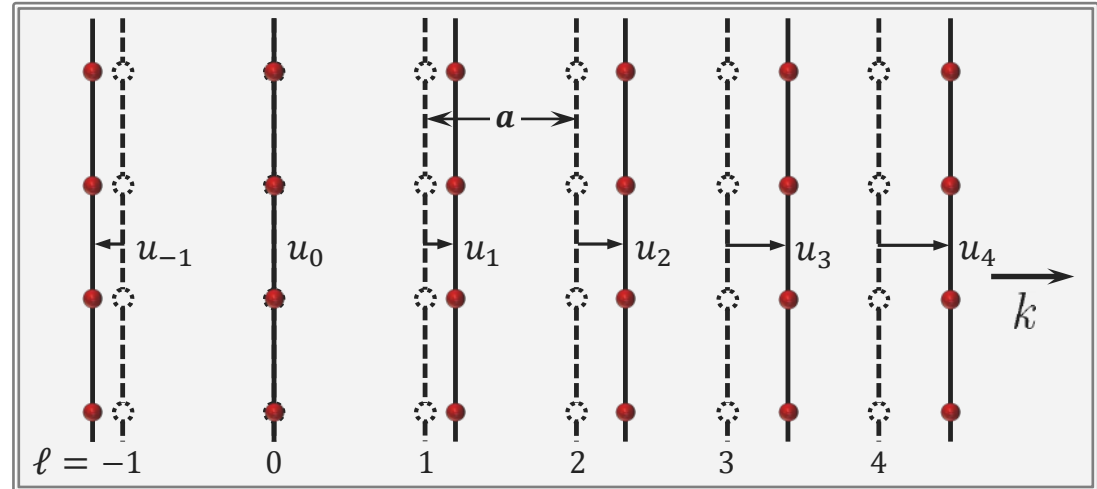
Relação de dispersão: $\beta > \alpha$



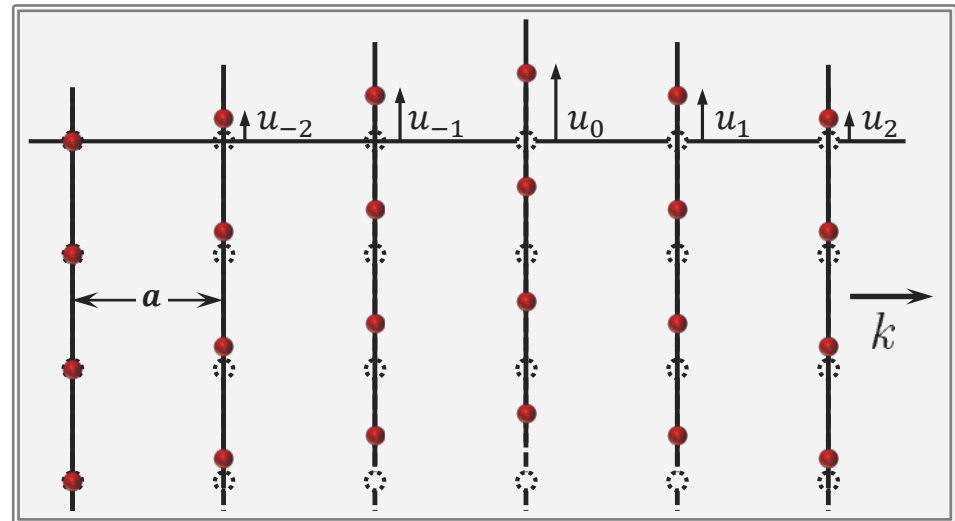
Vibrações da Rede

As figuras mostram planos de átomos nas posições de equilíbrio (linhas pontilhadas) e os planos de átomos quando deslocados (linhas sólidas). u 's representam deslocamentos dos planos.

onda longitudinal $\rightarrow$

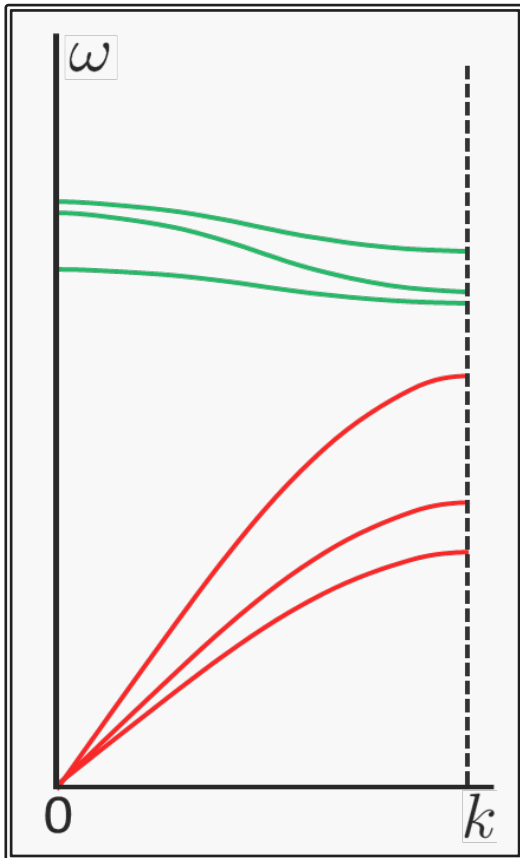


onda transversal $\rightarrow$



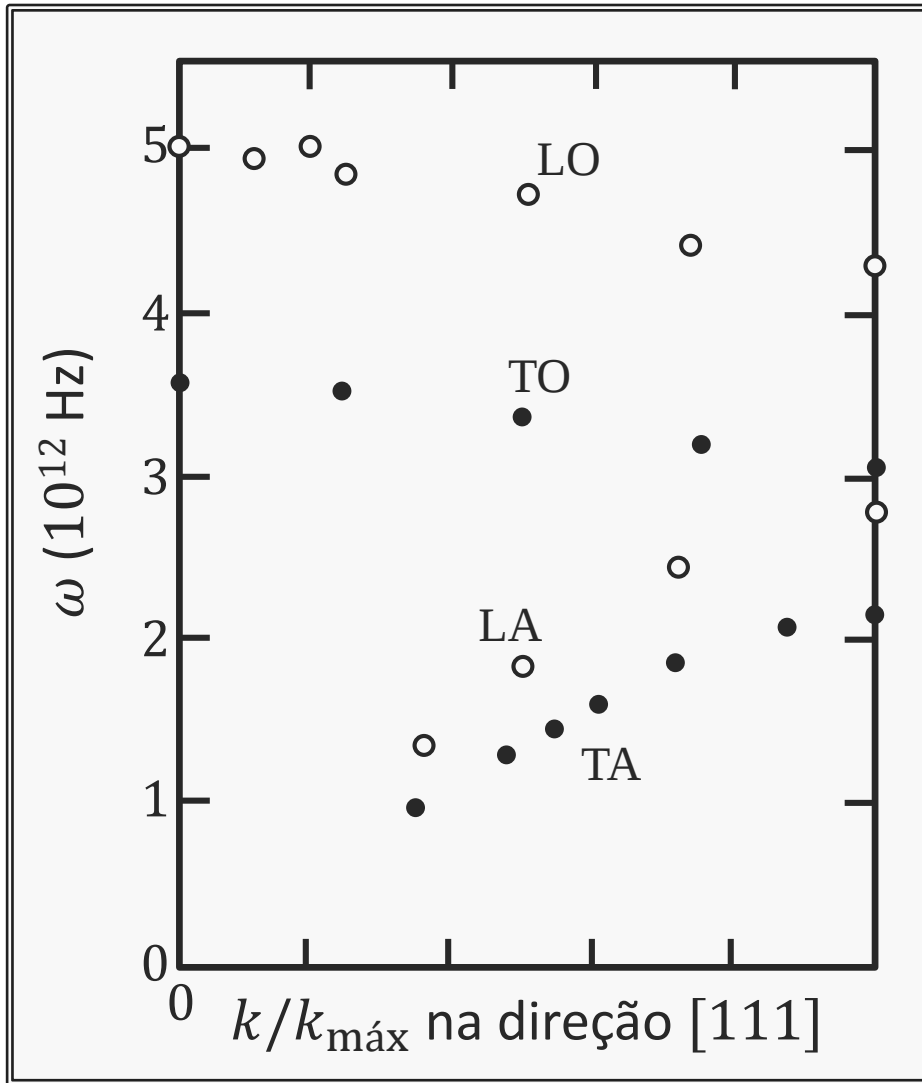
Vibrações da Rede

Cristais Tridimensionais: Se existirem p átomos por célula primitiva, ocorrerão $3p$ ramos na relação de dispersão: **3 ramos acústicos** e **$3p-3$ ramos óticos**. Se a dimensão do cristal for d , o número total de ramos é dp , o número de ramos acústicos é d e o número de ramos óticos é $pd - d$.



Curvas de dispersão ao longo de uma direção qualquer do espaço k para uma rede tridimensional com uma base de dois átomos por célula primitiva. As três curvas vermelhas (ramos acústicos) são lineares para valores de k muito pequenos. As três curvas verdes (ramos óticos) são quase horizontais, indicando que a interação intra-celular é muito mais forte que a entre as células.

Vibrações da Rede



Curvas de dispersão do KBr a 90K. A extrapolação para $k \rightarrow 0$ dos ramos LA (longitudinal acústico) e TA (transversal acústico) apresenta relação de dispersão linear e a extrapolação para $k = 0$ dos ramos TO (transversal ótico) e LO (longitudinal ótico) são chamados ω_T e ω_L