Estructura de la Materia 2 - Verano de 2026

Guía 5: Dinámica de redes

1. **(Opcional) Formalismo de matriz dinámica.**

Considere un cristal periódico de Bravais con una base de p átomos por celda. Sea $\mathbf{R}$ un vector de Bravais que etiqueta celdas unitarias, y sea $s = 1, \ldots, p$ el índice de átomo dentro de la base. Denote por $u_{\mathbf{R}si}(t)$ el desplazamiento pequeño del átomo s en la celda $\mathbf{R}$ en la dirección cartesiana $i \in \{x, y, z\}$. La masa del átomo s es m_s.

a) **Aproximación armónica.** Suponga que la energía potencial U del cristal puede expandirse alrededor del equilibrio como

$$U = U_0 + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{R}si} \sum_{\mathbf{R}'tj} u_{\mathbf{R}si}\, \Phi_{si,\,tj}(\mathbf{R}, \mathbf{R}')\, u_{\mathbf{R}'tj},$$

donde

$$\Phi_{si,\,tj}(\mathbf{R}, \mathbf{R}') \equiv \left. \frac{\partial^2 U}{\partial u_{\mathbf{R}si}\, \partial u_{\mathbf{R}'tj}} \right|_{\text{eq}}$$

son las *constantes de fuerza* (Hessiano del potencial).

1) Explique por qué, si el cristal es periódico e invariante por traslaciones, se cumple

$$\Phi_{si,\,tj}(\mathbf{R}, \mathbf{R}') = \Phi_{si,\,tj}(\mathbf{R} - \mathbf{R}'),$$

es decir, la constante de fuerza depende sólo de la diferencia de celdas.

2) (Regla de suma acústica) Justifique que la invariancia por traslación rígida del cristal implica

$$\sum_{\mathbf{R}',t} \Phi_{si,\,tj}(\mathbf{R} - \mathbf{R}') = 0 \qquad \text{para todo } (s, i, j).$$

b) **Ecuaciones de movimiento.** Usando que la fuerza es $F_{\mathbf{R}si} = -\partial U / \partial u_{\mathbf{R}si}$, muestre que las ecuaciones de movimiento en la aproximación armónica son

$$m_s\, \ddot{u}_{\mathbf{R}si}(t) = -\sum_{\mathbf{R}'tj} \Phi_{si,\,tj}(\mathbf{R} - \mathbf{R}')\, u_{\mathbf{R}'tj}(t).$$

c) **Ansatz de Bloch para modos normales.** Busque soluciones de la forma

$$u_{\mathbf{R}si}(t) = \frac{1}{\sqrt{m_s}}\, e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{R} - \omega t)}\, e_{si}(\mathbf{k}),$$

donde $e_{si}(\mathbf{k})$ es el vector de polarización.

1) Sustituya el ansatz en las ecuaciones de movimiento y muestre que el factor $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}$ se factoriza, reduciendo el problema a un sistema de tamaño $3r$.

2) Defina la *matriz dinámica* $D(\mathbf{k})$ como el objeto que satisface

$$\sum_{tj} D_{si,\,tj}(\mathbf{k})\, e_{tj}(\mathbf{k}) = \omega^2(\mathbf{k})\, e_{si}(\mathbf{k}),$$

y pruebe que sus elementos pueden escribirse como

$$D_{si,\,tj}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{m_s m_t}} \sum_{\mathbf{R}} \Phi_{si,\,tj}(\mathbf{R})\, e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}.$$

3) Use la regla de suma acústica para deducir que en $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ existen tres (en 3D) modos traslacionales con $\omega(\mathbf{0}) = 0$.

d) **Potencial armónico central (resortes).**

Considere que el átomo de referencia $(\mathbf{0}, s)$ y otro átomo $(\mathbf{R}, t)$ se pueden modelar mediante un enlace armónico central (resorte) con constante $C_{st}(\mathbf{R})$, tal que

$$U_{st}(\mathbf{R}) = \frac{C_{st}(\mathbf{R})}{2}\Big[\hat{\delta}_{st}(\mathbf{R})\cdot\big(\mathbf{u}_{\mathbf{R}t} - \mathbf{u}_{\mathbf{0}s}\big)\Big]^2, \qquad \boldsymbol{\delta}_{st}(\mathbf{R}) \equiv (\mathbf{R}+\boldsymbol{\tau}_t) - \boldsymbol{\tau}_s, \qquad \hat{\delta}_{st}(\mathbf{R}) \equiv \frac{\boldsymbol{\delta}_{st}(\mathbf{R})}{|\boldsymbol{\delta}_{st}(\mathbf{R})|},$$

donde $\boldsymbol{\delta}_{st}(\mathbf{R})$ es el vector de enlace en equilibrio.

Verifique que, para $(\mathbf{R}, t) \neq (\mathbf{0}, s)$, las constantes de fuerza pueden escribirse como

$$\Phi_{si,\,tj}(\mathbf{R}) = -C_{st}(\mathbf{R})\,\hat{\delta}_{st,i}(\mathbf{R})\,\hat{\delta}_{st,j}(\mathbf{R}) \;=\; -C_{st}(\mathbf{R})\big[\hat{\delta}_{st}(\mathbf{R})\hat{\delta}_{st}^{\mathsf{T}}(\mathbf{R})\big]_{ij}.$$

2. **Cálculo de matrices dinámicas (potencial armónico central).**

Considere los siguientes sistemas armónicos. Por defecto, el parámetro de red es a, la masa es m y la constante de fuerza es C, salvo que se indique lo contrario:

a) **Cadena monoatómica (1D, 1NN).**

b) **Cadena diatómica (1D, 1NN).** Masas alternadas m_1 y m_2.

c) **Cadena monoatómica con constantes alternadas (1D, 1NN).** Constantes alternadas C y C' (vecinos a distancia $a/2$).

d) **Red rectangular monoatómica (2D, 1NN+2NN).** Parámetros a y b; constantes C_1 (1NN) y C_2 (2NN).

e) **Red cúbica simple monoatómica (3D, 1NN).**

f) **Red tipo escalera (quasi-1D).** Dos cadenas acopladas con constantes $C_\parallel$ (a lo largo) y $C_\perp$ (entre cadenas).

En cada caso:

a) Identifique la dimensionalidad espacial d y el número de átomos por celda p.

b) Prediga cuántas ramas fonónicas se esperan (acústicas y ópticas) y justifique el conteo.

c) Construya la matriz dinámica $D(\mathbf{k})$ mediante el formalismo general y obtenga la relación de dispersión $\omega_n(\mathbf{k})$.

d) Analice límites o regímenes de interés (por ejemplo $m_1 \gg m_2$, $C_\perp \to 0$, $C' \to C$) e interprete los modos normales en dichos casos.

e) (Opcional) Grafique $\omega_n(\mathbf{k})$ a lo largo de un recorrido de alta simetría en la 1ZB y discuta cualitativamente $g(\omega)$.

Sugerencia. Para cada modelo, una estrategia sistemática es:

a) Fijar una celda unitaria conveniente (definir p y $\boldsymbol{\tau}_s$).

b) Listar los enlaces $(\mathbf{0}, s) \leftrightarrow (\mathbf{R}, t)$ y sus constantes.

c) Escribir $\Phi_{si,tj}(\mathbf{R})$ para cada enlace (y luego $\Phi_{si,sj}(\mathbf{0})$ por regla de suma acústica).

d) Calcular $D_{si,tj}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{m_s m_t}} \sum_{\mathbf{R}} \Phi_{si,tj}(\mathbf{R}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}$.

e) Diagonalizar $D(\mathbf{k})$ para obtener $\omega_n^2(\mathbf{k})$ y polarizaciones.

Comentario. La matriz dinámica $D(\mathbf{k})$ es de dimensión $dp \times dp$, donde d es la dimensionalidad espacial y p el número de átomos por celda. Sus dp autovalores $\omega_n^2(\mathbf{k})$ generan dp ramas fonónicas: en general hay d ramas acústicas ($\omega \to 0$ cuando $\mathbf{k} \to \mathbf{0}$) y $d(p-1)$ ramas ópticas.

Recordatorio. La densidad de estados fonónicos por unidad de volumen presenta *singularidades de Van Hove* cerca de frecuencias donde la velocidad de grupo $\nabla_{\mathbf{k}}\omega_n$ se hace pequeña (bandas planas, extremos, puntos silla).

3. **Modelos de Debye, Einstein y Debye–Einstein.**

Consideraremos dos modelos simples para aproximar la densidad de estados fonónicos: un espectro acústico continuo tipo Debye, un conjunto de modos ópticos degenerados tipo Einstein, y luego su combinación (Debye–Einstein).

La densidad de estados fonónicos *por unidad de volumen* puede escribirse como

$$g(\omega) \equiv \frac{G(\omega)}{V} = \sum_n \int_{1\text{ZB}} \frac{d^d k}{(2\pi)^d}\, \delta\big(\omega - \omega_n(\mathbf{k})\big).$$

El calor específico *volumétrico* puede escribirse como

$$c_V(T) \equiv \frac{C_V(T)}{V} = \int_0^\infty d\omega\, g(\omega)\, k_B \left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)^2 \frac{e^{\hbar\omega/k_B T}}{(e^{\hbar\omega/k_B T} - 1)^2}.$$

a) **Modelo de Debye.**

Suponga dispersión acústica lineal e isotrópica $\omega = vk$ y reemplace la 1ZB por una esfera $k < k_D$, con $\omega_D \equiv v\, k_D$.

1) Calcule explícitamente la densidad de estados fonónicos por unidad de volumen $g_D(\omega)$. Utilice coordenadas esféricas ($d^3k = 4\pi k^2 dk$) y la identidad

$$\delta(\omega - vk) = \frac{1}{v}\,\delta\Big(k - \frac{\omega}{v}\Big).$$

2) Determine la frecuencia de corte ω_D imponiendo la normalización de modos acústicos:

$$\int_0^{\omega_D} g_D(\omega)\, d\omega = 3n, \qquad n \equiv \frac{N}{V}.$$

3) Inserte $g_D(\omega)$ en la expresión de $c_V(T)$ y use el cambio $x = \hbar\omega/(k_B T)$ para llegar a una integral adimensional con límite superior T_D/T, donde T_D es la temperatura de Debye

$$T_D = \frac{\hbar\omega_D}{k_B}.$$

4) Estudie los límites $T \ll T_D$ y $T \gg T_D$, mostrando que $c_V(T) \propto T^3$ a bajas temperaturas y que $c_V(T) \to 3nk_B$ (Dulong–Petit) a altas temperaturas.

b) **Modelo de Einstein.**

Suponga que todos los modos vibran a una misma frecuencia ω_E.

1) Proponga una densidad de estados $g_E(\omega)$ (por unidad de volumen) y verifique que

$$\int_0^{\infty} g_E(\omega)\, d\omega = 3n.$$

2) Evalúe $c_V(T)$ usando la delta de Dirac e indique los límites $T \ll T_E$ y $T \gg T_E$, donde T_E es la temperatura de Einstein

$$T_E = \frac{\hbar\omega_E}{k_B}.$$

c) **Modelo de Debye–Einstein (combinado).**

Modele $3N$ modos acústicos tipo Debye y $3(p-1)N$ ópticos tipo Einstein con $\omega_E \gg \omega_D$:

$$g(\omega) = g_D(\omega) + 3(p-1)n\, \delta(\omega - \omega_E).$$

Verifique que la normalización total es $3pn$, escriba $c_V(T) = c_V^{(D)}(T) + c_V^{(E)}(T)$ y discuta:

1) el límite $T \to 0$,

2) la activación óptica cerca de $T \sim T_E$,

3) el límite clásico $T \to \infty$, $c_V \to 3pnk_B$.

d) **(Opcional).** Ejercite el procedimiento análogo para los casos 1D y 2D.