

FI 193 – Teoria Quântica de Sistemas de Muitos Corpos

2º Semestre de 2023

16/11/2023

Aula 26

Fônons

. DINÂMICA DA REDE CRISTALINAS (ÍONS)

. SUPOR UMA REDE DE BRAVAIS SIMPLES: UM ÁTOMO POR CÉLULA UNITÁRIA DE MASSA M

. SO HAVERÁ FÔNONS ACÚSTICOS (NÃO HAVERÁ FÔNONS ÓPTICOS).

. PEQUENOS DESLOCAMENTOS EM TORNO DAS POSIÇÕES DE EQUILÍBRIO: APROXIMAÇÃO HARMÔNICA.

. SUPOR (JÁ QUE OS ÁTOMOS NÃO SE AFASTAM MUITO DAS POSIÇÕES DE EQUILÍBRIO) QUE OS ÁTOMOS SÃO DISTINGUÍVEIS:

FUNÇÃO DE ONDA NÃO (ANTI-)SIMETRIZADA.

HAMILTONIANO:
$$H = \sum_{i \in \Lambda} \frac{p_{i\alpha}^2}{2M} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(\vec{R}_i - \vec{R}_j)$$

$\alpha = x, y, z$
 ou $1, 2, 3$

E_0

$p_{i\alpha}$ = α -ÉSIMA COMPONENTE CARTESIANA DO MOM. LINEAR DO i -ÉSIMO ÁTOMO

$R_{i\alpha}$ = α -ÉSIMA COMPONENTE CARTESIANA DA POSIÇÃO DO i -ÉSIMO ÁTOMO

$$[R_{i\alpha}, p_{j\beta}] = i \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta}$$

$V(\vec{R}_i - \vec{R}_j)$ = POTENCIAL DE INTERAÇÃO ENTRE OS ÍONS

$\vec{R}_i = \vec{R}_i^{(0)} + \vec{u}_i \Rightarrow \vec{R}_i^{(0)}$: VETORES DA REDE DE BRAVAIS,
 POSIÇÕES DE EQUILÍBRIO DOS ÍONS



$$[u_{i\alpha}, p_{j\beta}] = i \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta}$$

\vec{u}_i : PEQUENOS DESLOCAMENTOS EM TORNO DE $\vec{R}_i^{(0)}$

$|\vec{u}_i| \ll a, b, c$ (PARÂMETROS DA REDE)

EXPANDINDO $\psi(\vec{R}_i - \vec{R}_j)$ EM TORNO DAS POSIÇÕES DE EQUILÍBRIO:

$$\psi(\vec{R}_i - \vec{R}_j) = \psi(\vec{R}_i^{(0)} - \vec{R}_j^{(0)} + \vec{u}_i - \vec{u}_j) =$$

$$= \underbrace{\psi(\vec{R}_i^{(0)} - \vec{R}_j^{(0)})}_{\text{CONST.}} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial R_i^\alpha \partial R_j^\beta} \Big|_{\vec{R}_i^{(0)} - \vec{R}_j^{(0)}} (u_i^\alpha - u_j^\alpha)(u_i^\beta - u_j^\beta) + O(u^3)$$

CONST.
ENERGIA DE COESÃO DO SÓLIDO

TERMO LINEAR É NULO (EQUILÍBRIO)

IGNORAREMOS

$$\psi_0 = \frac{1}{4} \sum_{\substack{i \neq j \\ \alpha, \beta}} \frac{\partial^2 \psi}{\partial R_i^\alpha \partial R_j^\beta} \Big|_{(0)} (u_i^\alpha - u_j^\alpha)(u_i^\beta - u_j^\beta) + \text{CONST.}$$

$$= -\frac{1}{2} \sum_{\substack{i \neq j \\ \alpha, \beta}} \frac{\partial^2 \psi}{\partial R_i^\alpha \partial R_j^\beta} \Big|_{(0)} u_i^\alpha u_j^\beta + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i \neq j \\ \alpha, \beta}} \frac{\partial^2 \psi}{\partial R_i^\alpha \partial R_j^\beta} \Big|_{(0)} u_i^\alpha u_i^\beta$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\substack{i, j \\ \alpha, \beta}} u_i^\alpha C_{ij}^{\alpha\beta} u_j^\beta \Rightarrow C_{ij}^{\alpha\beta} = \begin{cases} -\frac{\partial^2 \psi}{\partial R_i^\alpha \partial R_j^\beta} \Big|_{(0)} & (i \neq j) \\ \sum_{q \neq i} \frac{\partial^2 \psi}{\partial R_i^\alpha \partial R_q^\beta} \Big|_{(0)} & (i = j) \end{cases}$$

PROPRIEDADES:

(i) $\sum_j C_{ij}^{\alpha\beta} = 0$ QUE É ÓBVA DA DEFINIÇÃO

SIGNIFICADO FÍSICO: SE $u_i^\alpha = \Delta$ (DESLOCAMENTO RÍGIDO DA REDE), A VARIAÇÃO DE ENERGIA EM RELAÇÃO AO EQUILÍBRIO, TEM QUE SER ZERO:

$$E_0 = \frac{1}{2} \sum_{\substack{ij \\ \alpha\beta}} \Delta C_{ij}^{\alpha\beta} \Delta = \frac{\Delta^2}{2} \sum_{\alpha\beta} \left[N \sum_j C_{ij}^{\alpha\beta} \right] = 0$$

(ii) $C_{ij}^{\alpha\beta} = C^{\alpha\beta}(\vec{R}_i^{(0)} - \vec{R}_j^{(0)})$ INVARIÂNCIA POR TRANSLAÇÕES DA REDE

(iii) $C_{ij}^{\alpha\beta} = C_{ji}^{\alpha\beta} = C_{ij}^{\beta\alpha}$

QUE VEM DA SIMETRIA DAS DERIVADAS SEGUNDAS POR TROCA E DO FATO DE QUE:

$$\rho(\vec{R}_i - \vec{R}_j) = \rho(|\vec{R}_i - \vec{R}_j|)$$

$$H = \sum_{i\alpha} \frac{P_{i\alpha}^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{ij \\ \alpha\beta}} U_i^\alpha C_{ij}^{\alpha\beta} U_j^\beta$$

A INVARIÂNCIA TRANSLACIONAL SUGERE QUE TOMEMOS A TRANSFORMADA DE FOURIER ESPACIAL:

$$U_i^\alpha = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k} \in BZ} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} U_{\vec{k}}^\alpha$$

$$U_{\vec{k}}^\alpha = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} U_i^\alpha$$

$$P_i^\alpha = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k} \in BZ} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} P_{\vec{k}}^\alpha$$

$$P_{\vec{k}}^\alpha = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} P_i^\alpha$$

ONDE FAREMOS A PARTIR DE AGORA: $\vec{R}_i^{(0)} \rightarrow \vec{R}_i$

$$i) P_{i\alpha}^\dagger = P_{i\alpha} \quad \text{E} \quad U_i^{\alpha\dagger} = U_i^\alpha$$

$$\Rightarrow (P_{\vec{k}}^\alpha)^\dagger = P_{-\vec{k}}^\alpha \quad \text{E} \quad (U_{\vec{k}}^\alpha)^\dagger = U_{-\vec{k}}^\alpha$$

$$ii) [U_i^\alpha, P_{j\beta}] = i \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta} \Rightarrow [U_{\vec{k}}^\alpha, P_{\vec{k}'}^\beta] = i \delta_{\alpha\beta} \delta_{\vec{k}, -\vec{k}'}$$

LEVANDO EM H:

$$H = \frac{1}{2M} \sum_{\vec{k}, \alpha} \underbrace{p_{-\vec{k}}^\alpha}_{(p_{\vec{k}}^\alpha)^\dagger} p_{\vec{k}}^\alpha + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} \underbrace{u_{-\vec{k}}^\alpha}_{(u_{\vec{k}}^\alpha)^\dagger} C^{\alpha\beta}(\vec{k}) u_{\vec{k}}^\beta$$

ONDE:

$$C^{\alpha\beta}(\vec{k}) = \sum_j e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_j} C_{0j}^{\alpha\beta} = C^{\alpha\beta}(-\vec{k}) \quad \text{"MATRIZ DINÂMICA"}$$

(i) $C^{\alpha\beta}(\vec{k}) \in \mathbb{R}$

(ii) $C^{\alpha\beta}(\vec{k}) = C^{\beta\alpha}(\vec{k})$ (SIMÉTRICA)

PORTANTO, ELA É DIAGONALIZÁVEL, ATRAVÉS DE UMA TRANSFORMAÇÃO ORTOGONAL.

(iii) $C^{\alpha\beta}(\vec{k}) \xrightarrow[|\vec{k}| \rightarrow 0]{\vec{k}} 0$ SE $\mathcal{O}(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$ É DE CURTO

ALCANCE

DIAGONALIZAÇÃO DA MATRIZ DINÂMICA:

$$\sum_{\alpha} C^{\alpha\beta}(\vec{k}) E_{\alpha}^{\beta}(\vec{k}) = M \omega_s^2(\vec{k}) E_s^{\alpha}(\vec{k}) \quad (\text{EQ. DE AUTOVALOR})$$

$(s=1, 2, 3)$

(i) AUTO-VALORES REAIS E POSITIVOS (PORQUE

SE TRATA DE MODOS NORMAIS DE VIBRAÇÃO EM TORNO DO EQUILÍBRIO)

(ii) AUTO-VETORES REAIS

(iii) ORTONORMALIDADE DOS AUTO-VETORES:

$$\sum_{\alpha} E_s^{\alpha}(\vec{k}) E_{s'}^{\alpha}(\vec{k}) = \delta_{s,s'}$$

FECHAMENTO:

$$\sum_s E_s^{\alpha}(\vec{k}) E_s^{\beta}(\vec{k}) = \delta_{\alpha\beta}$$

(ii) PARA REDES DE BRAVAIS E CRISTAIS CÚBICOS,
SEMPRE SE PODE ESCOLHER UM DOS AUTO-VETORES
COMO PARALELO A \vec{k} :

$$S=1: \vec{E}_1(\vec{k}) \parallel \vec{k}$$

$$S=2,3: \vec{E}_s(\vec{k}) \perp \vec{k} \quad (s=2,3)$$

iii) COMO $C^{\alpha\beta}(\vec{k}) \xrightarrow{|\vec{k}| \rightarrow 0} 0$ SE GUE QUE:

$$\omega_s(\vec{k}) \xrightarrow{|\vec{k}| \rightarrow 0} 0$$

CONSEQUÊNCIA DO TEOREMA DE GOLDSTONE:

- SIMETRIA ^{CONTÍNUA} DE TRANSLAÇÃO DO ESPAÇO VAZIO
- INTERAÇÃO DE CURTO ALCANCE

\Rightarrow EXISTEM MODOS BOSÔNICOS CUJA DISPERSÃO ~ 0
SE $|\vec{k}| \rightarrow 0$

EXPANDIMOS \vec{u}_k E \vec{p}_k NA BASE $\vec{e}_s(\vec{k})$:

$$\vec{u}_k = \sum_{s=1}^3 u_k^s \vec{e}_s(\vec{k})$$

$$u_k^s = \vec{u}_k \cdot \vec{e}_s(\vec{k})$$

$$\vec{p}_k = \sum_{s=1}^3 p_k^s \vec{e}_s(\vec{k})$$

$$p_k^s = \vec{p}_k \cdot \vec{e}_s(\vec{k})$$

$$E_0 = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} \sum_{\alpha\beta} (u_k^\alpha)^\dagger C^{\alpha\beta}(\vec{k}) u_k^\beta = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} \sum_{\alpha\beta} \sum_{\lambda, s} (u_k^\lambda)^\dagger \underbrace{[e_\lambda^\alpha(\vec{k})]^\dagger C^{\alpha\beta}(\vec{k}) e_\lambda^\beta(\vec{k})}_{M \omega_s^2(\vec{k}) e_s^\alpha(\vec{k})} u_k^s$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} \sum_{\lambda, s} (u_k^\lambda)^\dagger M \omega_s^2(\vec{k}) u_k^s \underbrace{\left[\sum_{\alpha} e_\lambda^\alpha(\vec{k}) e_s^\alpha(\vec{k}) \right]}_{\delta_{\lambda, s}}$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}, s} M \omega_s^2(\vec{k}) (u_k^s)^\dagger u_k^s$$

$$H = \sum_{\vec{k}, s} \left[\frac{(p_k^s)^\dagger p_k^s}{2M} + \frac{M}{2} \omega_s^2(\vec{k}) (u_k^s)^\dagger u_k^s \right]$$

QUE TEM A
FORMA USUAL
DO OSCILADOR
HARMÔNICO

DEFINO:

$$\left. \begin{aligned} U_{\vec{k}}^s &= \frac{1}{\sqrt{2M\omega_s(\vec{k})}} (a_{\vec{k},s} + a_{-\vec{k},s}^\dagger) \\ P_{\vec{k}}^s &= \frac{1}{i} \sqrt{\frac{M\omega_s(\vec{k})}{2}} (a_{\vec{k},s} - a_{-\vec{k},s}^\dagger) \end{aligned} \right\} \begin{aligned} (U_{\vec{k}}^s)^\dagger &= U_{-\vec{k}}^s \\ (P_{\vec{k}}^s)^\dagger &= P_{-\vec{k}}^s \end{aligned}$$

DONDE: $[a_{\vec{k},s}, a_{\vec{k}',s'}^\dagger] = \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \delta_{s,s'}$

$$\Rightarrow H = \sum_{\vec{k},s} \omega_s(\vec{k}) \left[a_{\vec{k},s}^\dagger a_{\vec{k},s} + \frac{1}{2} \right]$$

$a_{\vec{k},s}^\dagger$ CRIA UM FÓNON DE VETOR DE ONDA \vec{k}
E POLARIZAÇÃO s

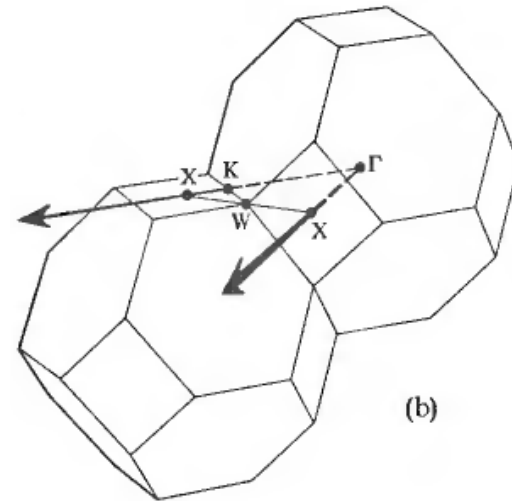
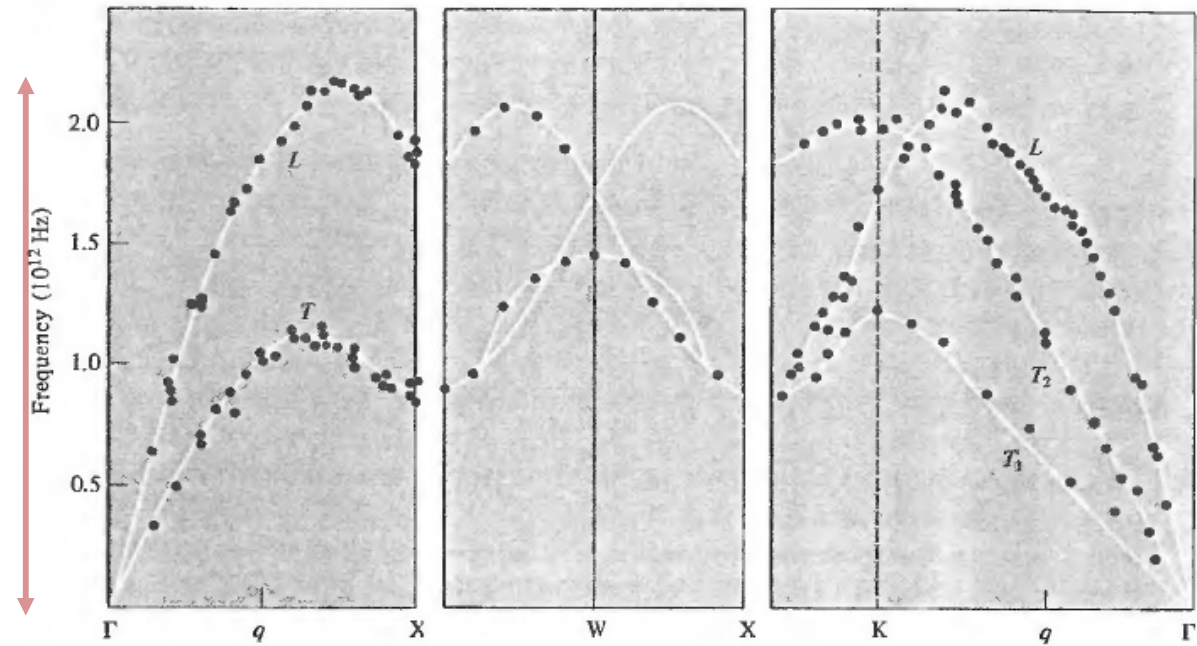
BÓSONS COM $\mu=0$, CUJO NÚMERO MÉDIO É
DETERMINADO APENAS PELA TEMPERATURA:

$$\langle a_{\vec{n},s}^+ a_{\vec{n},s} \rangle = \frac{1}{e^{\beta \omega_s(\vec{n})} - 1}$$

TERMOS ANARMÔNICOS, CÚBICOS, QUÁRTICOS, ETC.
EM u E, PORTANTO, EM $a_{\vec{k},s}^+$, $a_{\vec{k},s}$ SÃO
IMPORTANTES, POR EXEMPLO, PARA TRANSPORTE
TÉRMICO ATRAVÉS DA REDE.

Fônons acústicos no Chumbo (FCC)

Frequência/energia de Debye: ω_D
2 THz = 8.3 meV = 96 K



Temperaturas de Debye

Table 23.3
DEBYE TEMPERATURES FOR SELECTED ELEMENTS^a

ELEMENT	Θ_D (K)	ELEMENT	Θ_D (K)
Li	400	A	85
Na	150	Ne	63
K	100		
		Cu	315
Be	1000	Ag	215
Mg	318	Au	170
Ca	230		
		Zn	234
B	1250	Cd	120
Al	394	Hg	100
Ga	240		
In	129	Cr	460
Tl	96	Mo	380
		W	310
C (diamond)	1860	Mn	400
Si	625	Fe	420
Ge	360	Co	385
Sn (grey)	260	Ni	375
Sn (white)	170	Pd	275
Pb	88	Pt	230
		La	132
As	285	Gd	152
Sb	200	Pr	74
Bi	120		

^a The temperatures were determined by fitting the observed specific heats c_v to the Debye formula (23.26) at the point where $c_v = 3nk_B/2$. Source: J. de Launay, *Solid State Physics*, vol. 2, F. Seitz and D. Turnbull, eds., Academic Press, New York, 1956.

Fônons acústicos e óticos

