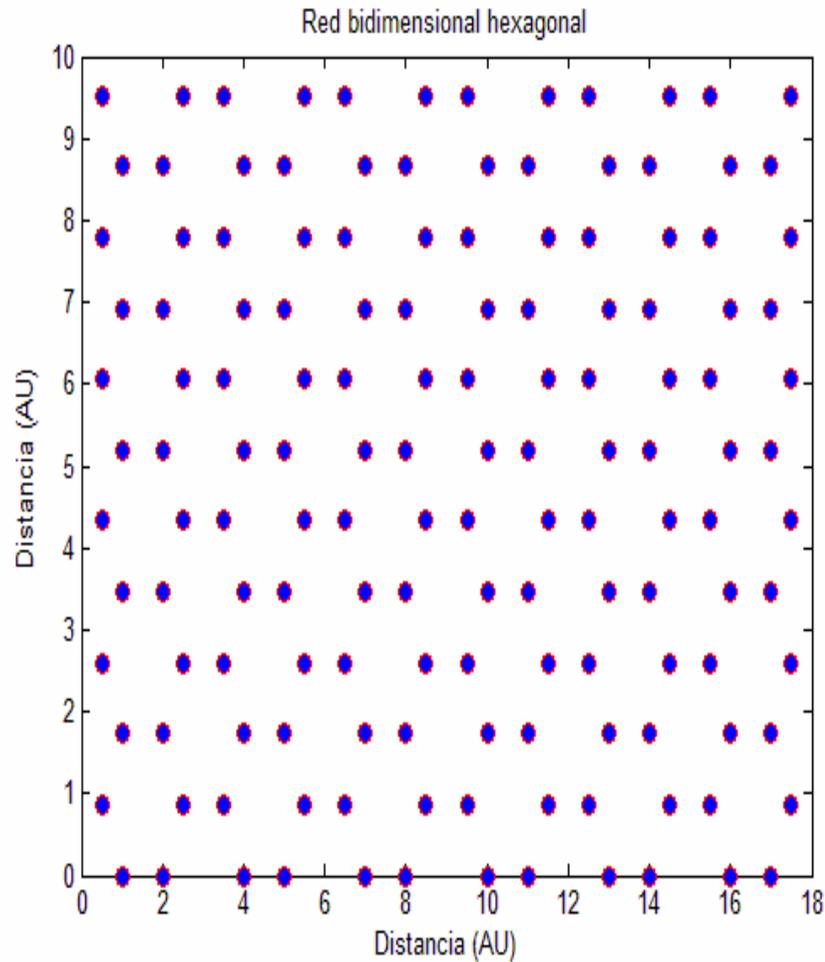

*Estudio de fonones en el grafeno
mediante la aproximación “stretching-
bending”*

Gonzalo Camacho Patricio

UAM

El modelo

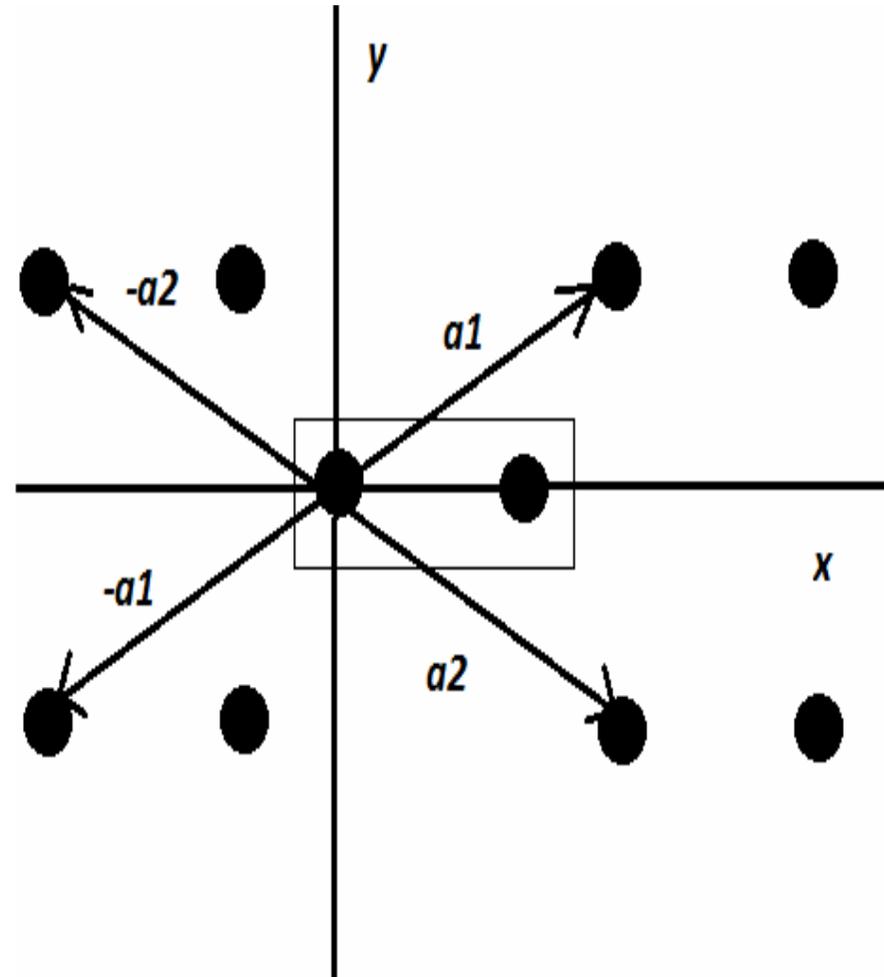


- Identificación de las celdas unidad con dos átomos base.
- Vectores de la red de Bravais.
- Elección correcta del sistema de coordenadas.

El modelo

- a_1 y a_2 son vectores de Bravais
- Los vectores base del espacio recíproco, b_1 y b_2 cumplen

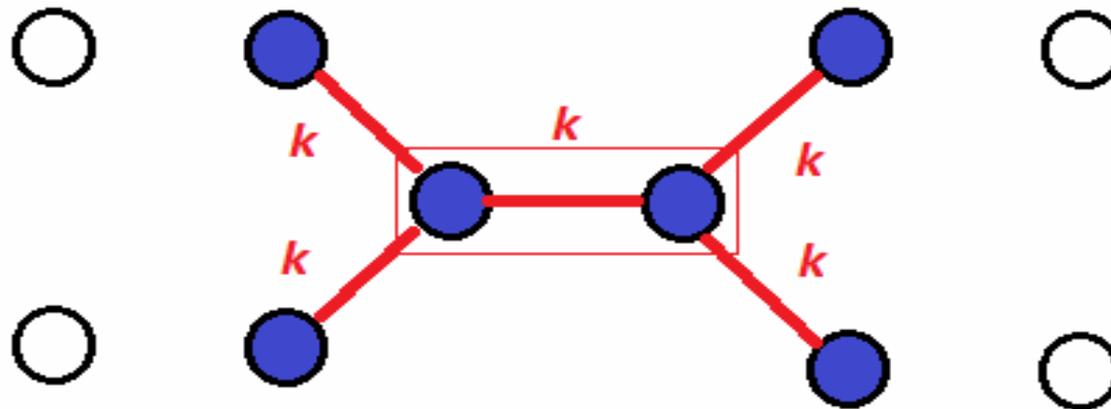
$$\vec{b}_i \cdot \vec{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$$



El modelo

- Consideramos además las mismas masas m , y unas constantes k iguales para todos los átomos

Interacción a primeros vecinos



Aproximación de “stretching”

- A partir de la U del sistema, podemos encontrar las entradas de la matriz dinámica
- Esto nos permitirá resolver la ecuación de autovalores

$$\hat{D}(q) \vec{\xi} = \hat{M} \omega^2(q) \vec{\xi}$$

- Es un problema de diagonalización de $D(q)$
-

La U del sistema

- En la aproximación de “*stretching*”

$$U = \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} k \left[(s_i - s_j) \cdot \hat{r}_{ij} \right]^2$$

- Cuando consideremos también el “*bending*”, se añade un término

$$U = \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (k_s - k_b) \left[(s_i - s_j) \cdot \hat{r}_{ij} \right]^2 + k_b |s_i - s_j|^2$$

Resolución analítica para el stretching

- Una vez desarrollada la U, hallamos las entradas de las matrices D(R)

$$\hat{D}_{\mu\nu}(R-R') = \frac{\partial^2 U}{\partial u_{\mu}(R) \partial u_{\nu}(R')}$$

- D(q) será una matriz hermítica del tipo

$$\hat{D}(q) = \sum_R e^{iqR} \hat{D}(R)$$

Frecuencias: Relación de dispersión

- Analíticamente se obtienen los autovalores

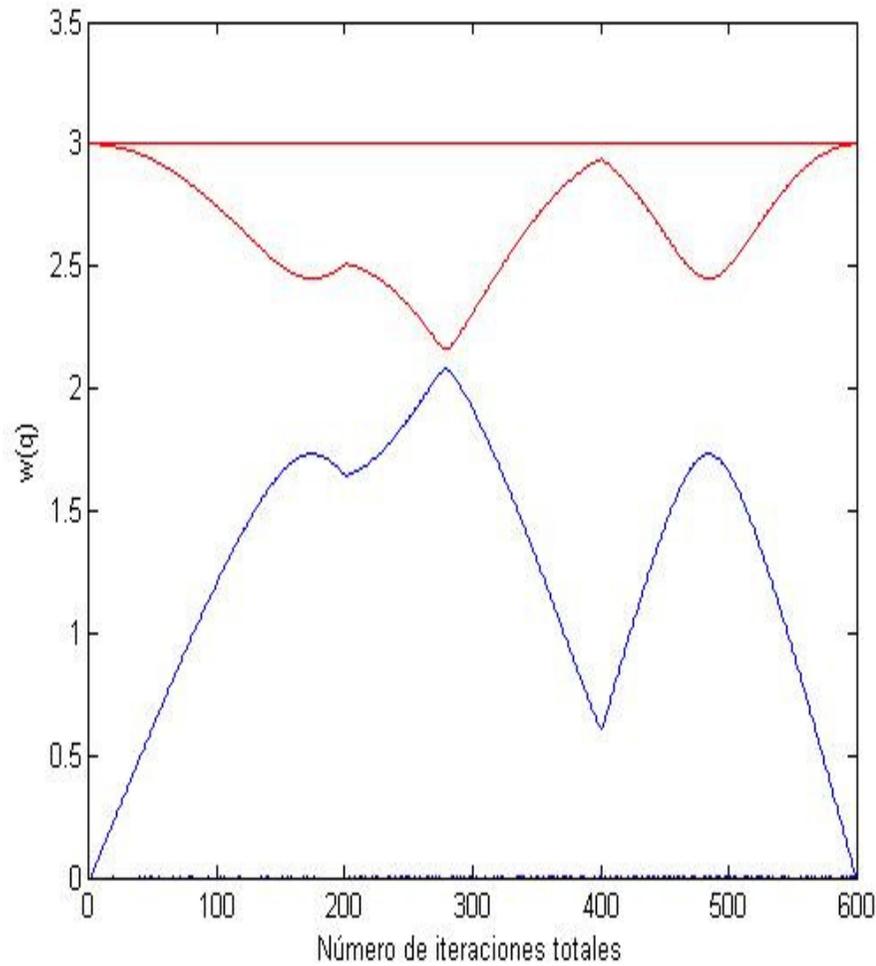
$$\omega_1 = 0$$

$$\omega_2 = \sqrt{\frac{3k}{m}}$$

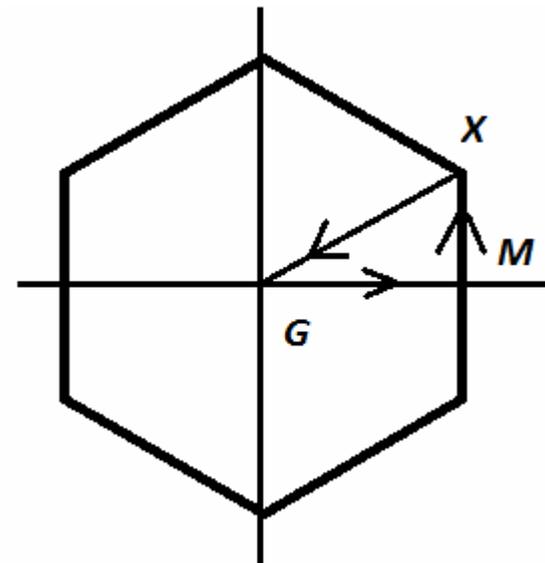
$$m\omega_3^2 = \frac{3k}{2} + \frac{k}{2} \sqrt{3 + 2(\cos(q.a_1) + \cos(q.a_2) + \cos(q.(a_1 - a_2)))}$$

$$m\omega_4^2 = \frac{3k}{2} - \frac{k}{2} \sqrt{3 + 2(\cos(q.a_1) + \cos(q.a_2) + \cos(q.(a_1 - a_2)))}$$

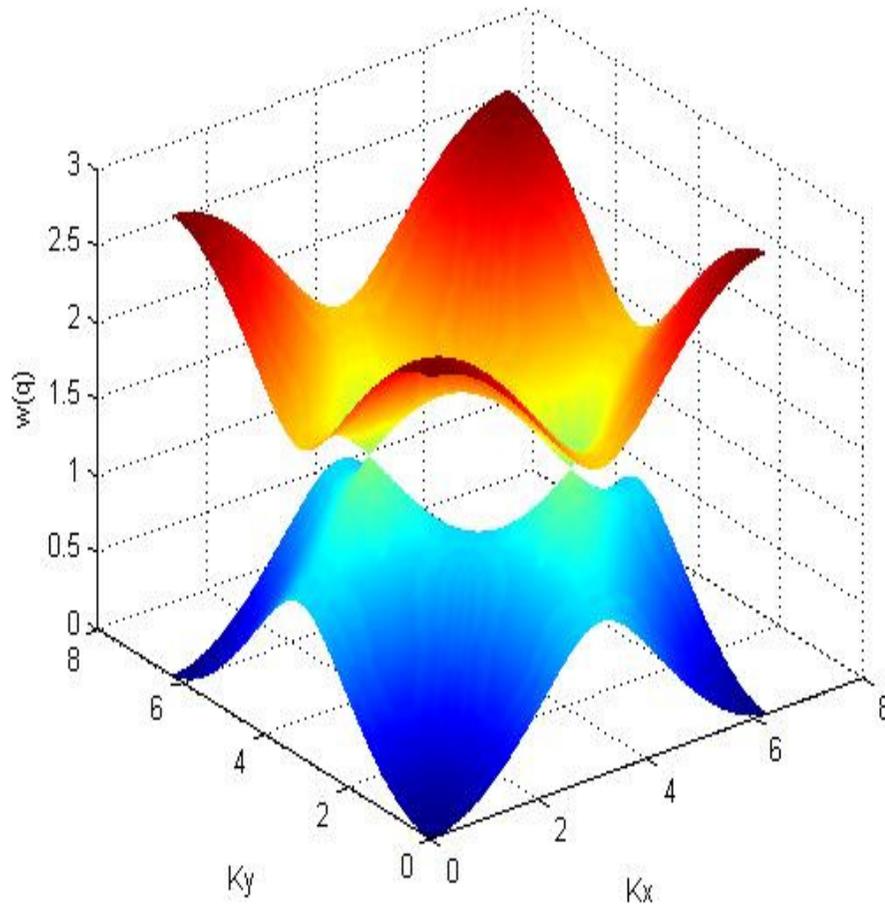
Representación gráfica



- Nos hemos movido en la 1a zona de Brillouin: parametrización del recorrido.



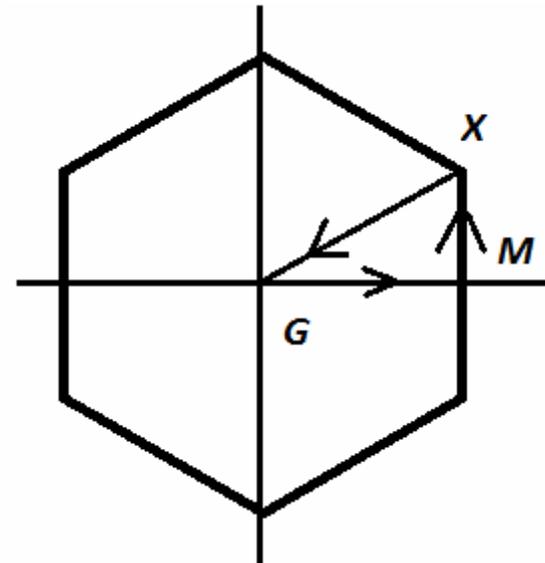
Un plot en 3D



- Es una representación en el espacio recíproco
- ¿Qué nos indica que $\omega_1 = 0$?
- Debemos mejorar el modelo con el *bending*

El problema numérico

- El considerar bending añade un término que hace que los autovalores de $D(q)$ sean “imposibles” de obtener de manera analítica
- Empleo de un método numérico para resolver $D(q)$: consiste en parametrizar q a lo largo de los recorridos



El problema numérico

- Necesitamos expresar las coordenadas de q en la base

$$\left\{ \vec{b}_1, \vec{b}_2 \right\}$$

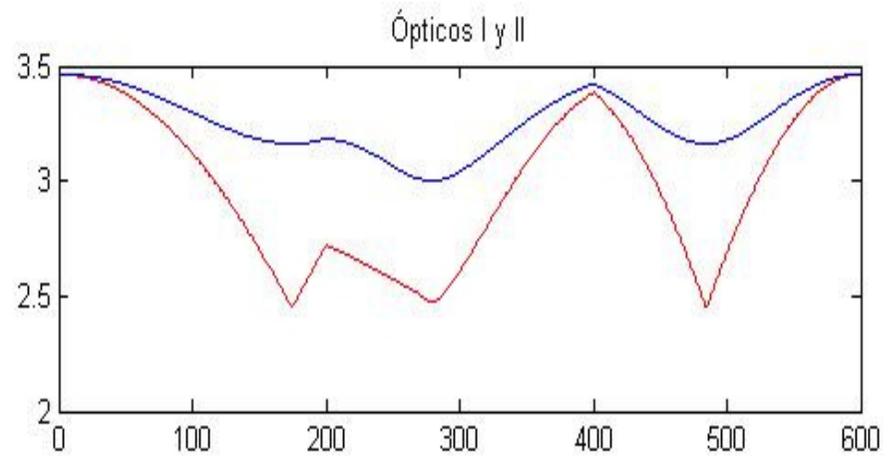
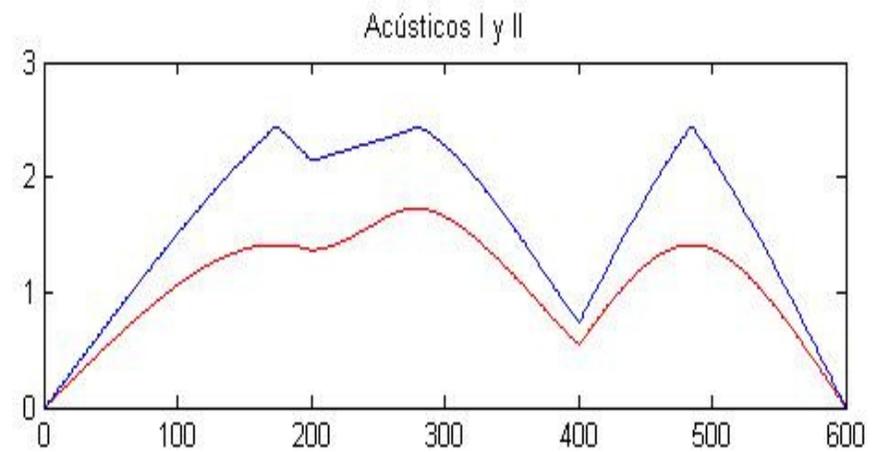
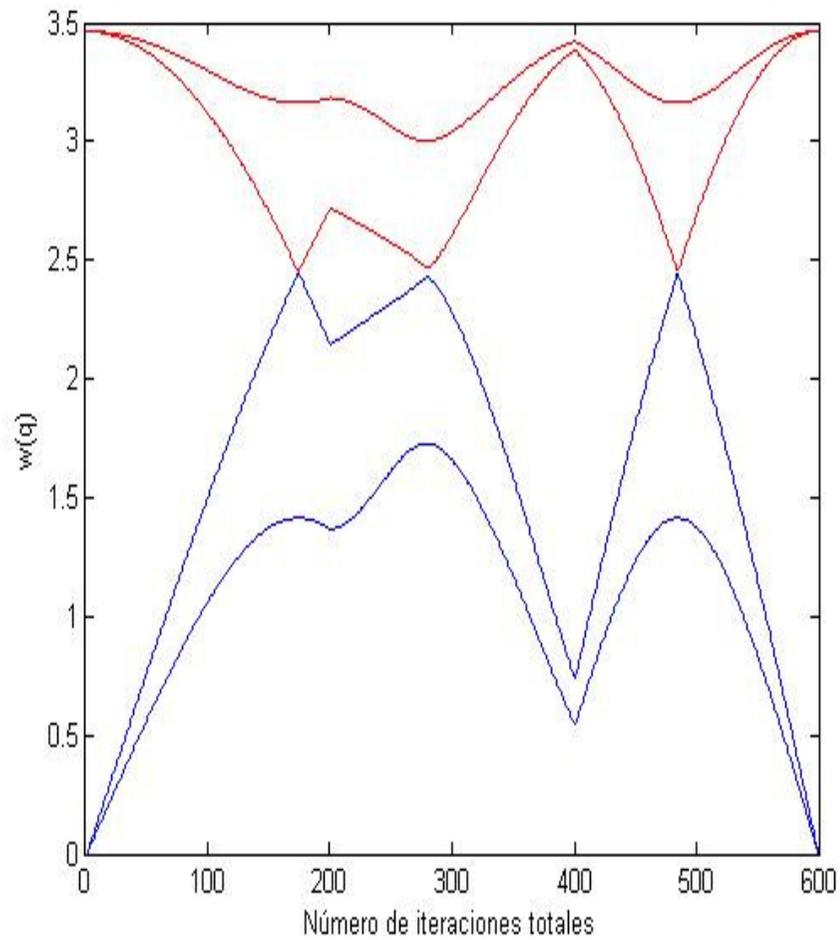
- Numéricamente, los valores de q en cada recorrido vienen dados por un parámetro. En la i -ésima iteración

$$q_i = \alpha \left| \vec{q} \right|$$

- El bending añade nuevos términos k_b a las $D(R)$. Además

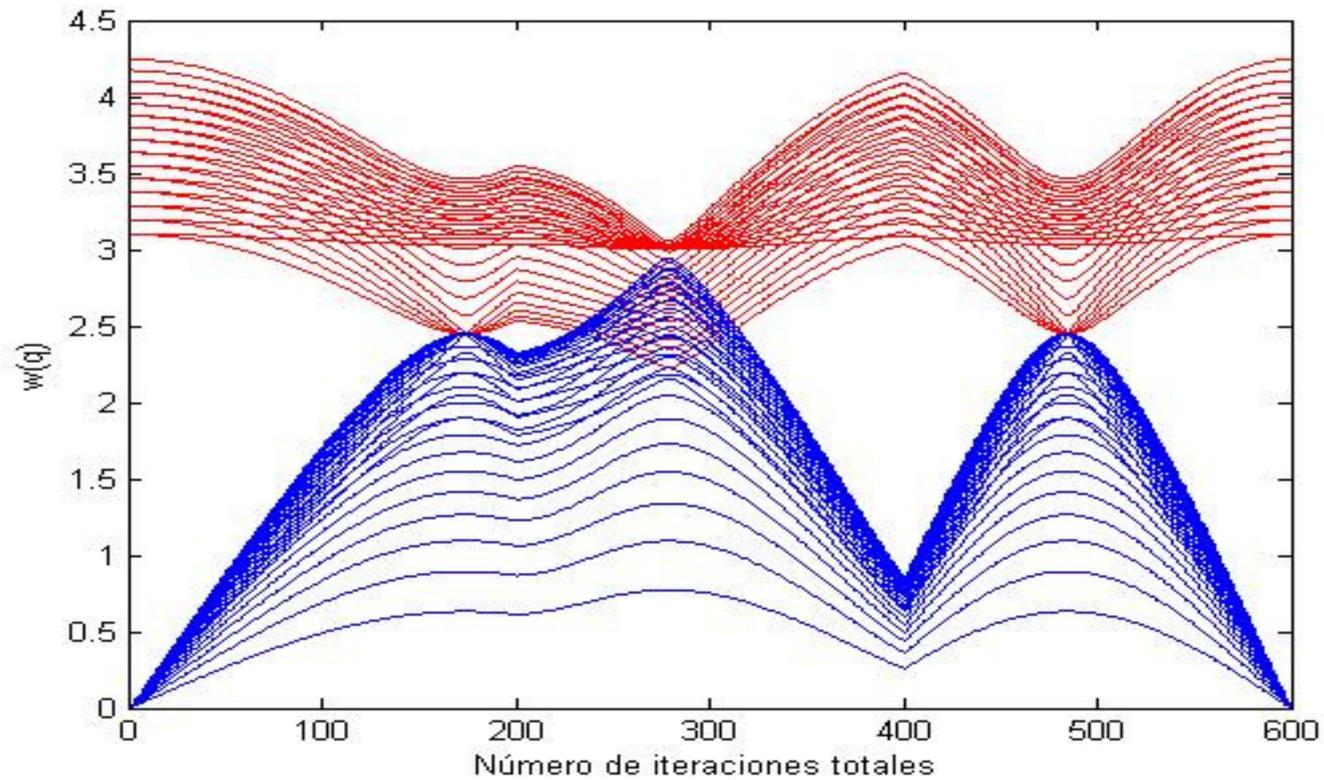
$$k_b \leq k_s$$

Relación de dispersión SB



Relación de dispersión SB

- Podemos ir cambiando k_b



Caso del nitruro de boro

- Consiste en un material de una sola capa de átomos de N y B en la misma proporción, también dispuestos en red hexagonal.
- Ahora, la celda unidad tiene dos masas distintas, m_1 y m_2 .
- Problema de autovalores generalizado.

$$\hat{D}(q) \vec{\xi} = \hat{M} \omega^2(q) \vec{\xi}$$

Problema de autovalores generalizado

- Sabemos resolverlo con la matriz raíz cuadrada

$$\hat{M}^{1/2} = R \text{diag}(\sqrt{m_1}, \sqrt{m_2} \dots) R^t$$

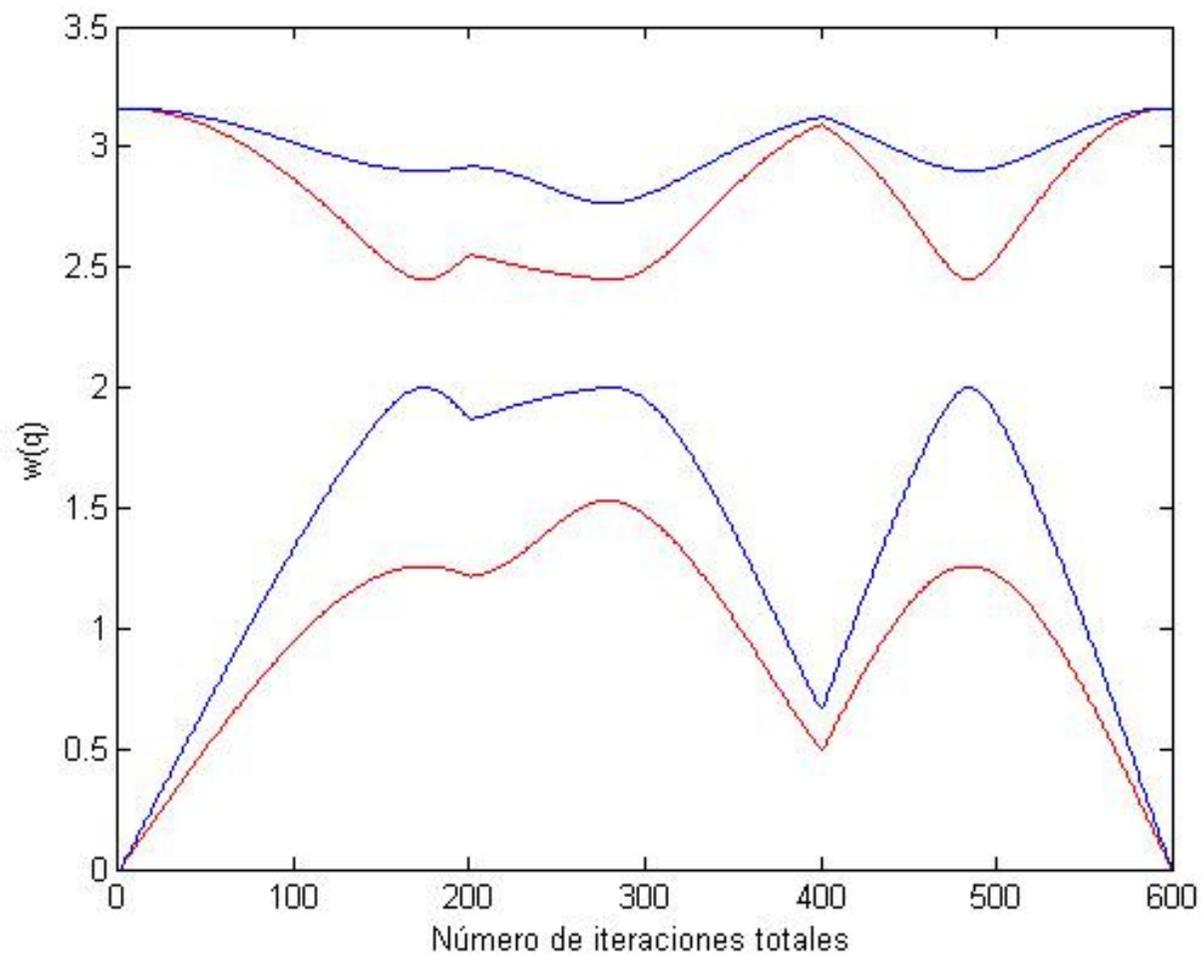
- Matriz hermítica definida positiva

$$\hat{M}^{-1/2} \hat{D}(q) \hat{M}^{-1/2}$$

$$(\hat{M}^{-1/2} \hat{D}(q) \hat{M}^{-1/2}) (\hat{M}^{1/2} \vec{\xi}_i) = \omega_i^2 (\hat{M}^{1/2} \vec{\xi}_i)$$

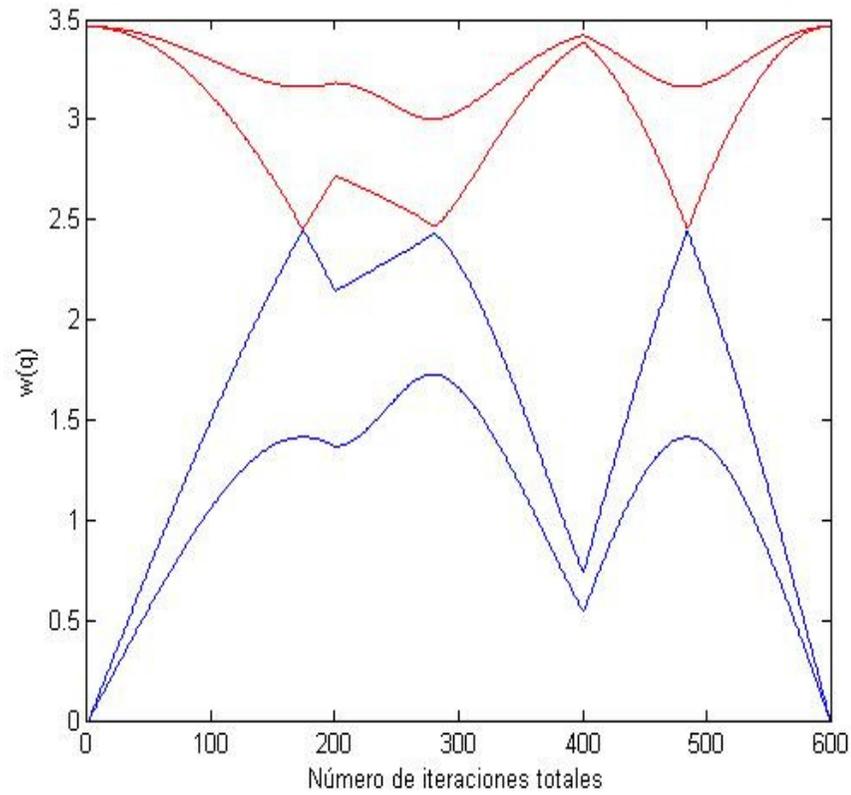
- Se resuelve el problema generalizado

Relación de dispersión del nitruro de boro

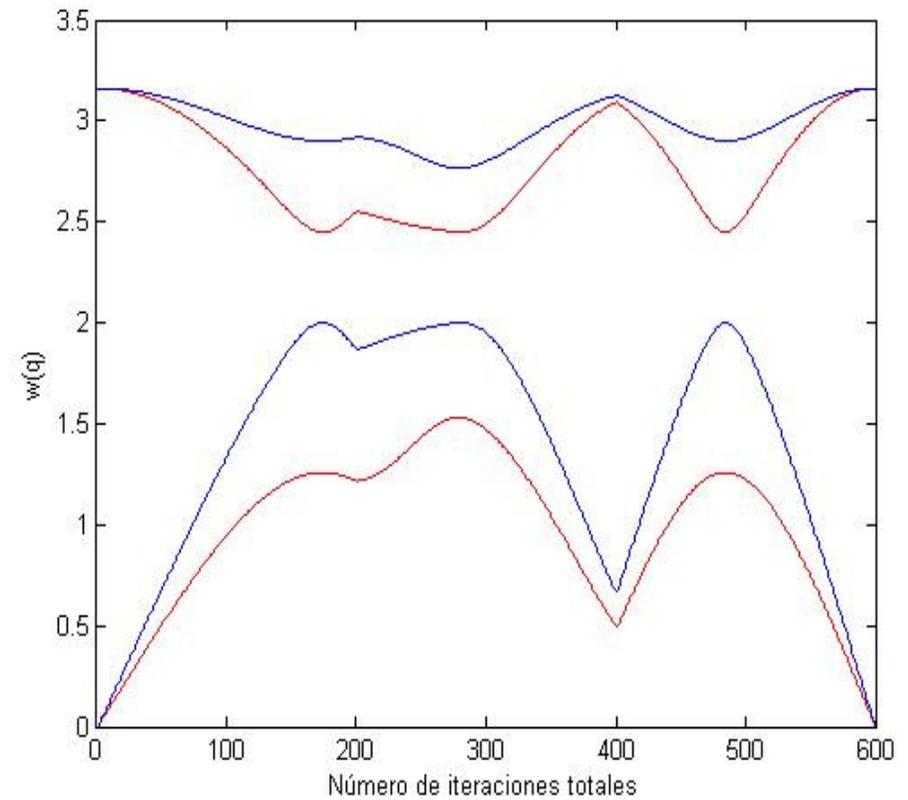


Comparación con el grafeno

■ Grafeno



■ Nitruro de Boro



Simulaciones

- Veremos los desplazamientos en la celda unidad de los átomos
 - Modos acústicos y ópticos
 - Se representa en un punto de la zona de Brillouin, concretamente, uno elegido al azar del 2º recorrido
-

Simulaciones

- También nos interesa el desplazamiento de la red en conjunto
 - Es una convolución de los movimientos de cada celda unidad, modulados por un factor de fase e^{ikR} para cada celda
 - El programa también selecciona un punto arbitrario de la primera zona de Brillouin
 - Representación del 2º modo óptico
-

Referencias

- Ashcroft, Neil W, Mermin, David N, *“Solid state physics”*,
College edition

 - Efthimios Kaxiras, *“Atomic and electronic structure of solids”*,
Cambridge University Press
-