

**EFFECTOS ANARMÓNICOS
EN CRISTALES CON
ESTRUCTURA DE DIAMANTE**

TESIS QUE PRESENTA

JOSE LUIS ESCAMILLA REYES

PARA OBTENER EL GRADO DE

MAESTRO EN FÍSICA

DICIEMBRE DE 1994

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA IZTAPALAPA

DIVISIÓN DE CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍA

DEPARTAMENTO DE FÍSICA

AGRADECIMIENTOS

Agradezco, en primer lugar, a mis padres Cecilio Escamilla y Ana María Reyes por su apoyo, amor y comprensión. A mi asesor, el Dr. Emmanuel Haro Poniowski, deseo expresar mi gratitud por su dirección y por la revisión crítica de esta tesis. A los doctores Eleuterio Castaño y Bernardo Mendoza por haber aceptado amablemente formar parte del jurado. Sus comentarios y observaciones fueron muy útiles para corregir algunos errores de forma y contenido del presente trabajo. Agradezco el apoyo otorgado por CONACyT a través de la concesión de una beca de Maestría.

A mis hermanos Fernando, Graciela, Enrique, Martha, Mario y Jorge por todo el apoyo y el cariño que me han dado. A Rosita, por su amor, paciencia y comprensión (y por su sonrisa) que me hace ver que la vida es algo más que las ecuaciones. A Miguel Angel Olivares, Israel Wood y Donato Vasquez (así, con "s") solamente debo decirles gracias por su amistad.

Finalmente, agradezco a todos mis compañeros del LOC, a Mauricio Romero y a todos aquellos que de una u otra forma han estado cerca de mí todos estos años.

INDICE

Agradecimientos	0
Introducción	1
1. Aproximación Armónica y Dinámica de la Red	4
1.1 Introducción	4
1.2 Descripción de la Estructura de Diamante	4
1.3 Dinámica de la Red	6
1.4 Ecuaciones de Movimiento y Dinámica de la Red	7
1.5 Constantes Atómicas de Fuerza e Interacciones de Campo Central	9
2. Coeficientes Anarmónicos en Direcciones de Alta Simetría	12
2.1 Introducción	12
2.2 Anarmonicidad en Cristales con Estructura de Diamante	12
2.3 Decaimiento del Fonón Óptico en dos Fonones LA en la Dirección [100]	14
2.4 Decaimiento del Fonón Óptico en un Fonón LA y un TA (Dir. [100])	16
2.5 Decaimiento del Fonón Óptico en dos Fonones LA (Dir. [111])	18
2.6 Decaimiento del Fonón Óptico en un Fonón LA y un TA (Dir. [111])	20
2.7 Decaimiento del Fonón Óptico en Dos Fonones TA_z (Dir. [110])	22
2.8 Resumen	24
3. Modelo de Wanser y Wallis	25
3.1 Introducción	25
3.2 Modelo Armónico	25
3.3 Modelo Anarmónico	28
3.4 Modelo de Cuatro Parámetros	28
4. Ancho de Línea	31
4.1 Introducción	31
4.2 Respuesta del Cristal ante una Perturbación	31
4.3 La Formulación de Funciones de Green	31
4.4 Funciones de Green para un Fonón y Ancho de Línea	32
5. Cálculos Numéricos	36
5.1 Introducción	36
5.2 Curvas de Dispersión	36
5.3 Ancho de Línea en Función de la Temperatura	37
5.4 Comparación con otros Modelos Teóricos	38
5.5 Resumen	39
6. Conclusiones y Perspectivas	40
Apéndice A	43

Apéndice B	45
Apéndice C	46
Apéndice D	47
Apéndice E	50
Referencias	55

INTRODUCCIÓN

La teoría de fonones independientes, usualmente conocida como **aproximación armónica**, há sido de gran utilidad para entender y describir las propiedades de un sólido y sus predicciones concuerdan con los datos experimentales obtenidos por, digamos, experimentos de esparcimiento de neutrones. Sin embargo, existe un conjunto de fenómenos que no pueden ser explicados dentro de dicho esquema :

a) La teoría del cristal armónico predice que el calor específico, en el límite de altas temperaturas ($T \gg \Theta_D$, siendo Θ_D la temperatura de Debye del sólido), debe seguir el comportamiento dictado por la ley de Dulong y Petit. En realidad, a altas temperaturas, el calor específico no sigue este comportamiento.

b) En la aproximación armónica el tamaño de un cristal, en el equilibrio, no depende de la temperatura. La existencia de términos de orden superior al cuadrático en el Hamiltoniano permite describir la expansión térmica en los sólidos.

c) En la descripción armónica del esparcimiento de neutrones, se afirma que la sección transversal de esparcimiento inelástico presenta picos agudos en las energías permitidas por las leyes de conservación que gobiernan a los procesos de un fonón. El experimento muestra, sin embargo, que los picos observados poseen un ancho medible y que este ancho es el inverso del tiempo de vida del fonón.

Así, al conjunto de fenómenos que salen del esquema armónico se le conoce como *anarmonicidad*. Para tratar de describir estos y otros fenómenos, desarrollamos en serie de potencias al Hamiltoniano vibracional del cristal, manteniendo los términos cúbico y cuártico :

$$\begin{aligned}
 H = & \frac{1}{2} \sum_{l\kappa\alpha} \frac{p_\alpha^2(l\kappa)}{M_\kappa} + \frac{1}{2} \sum_{l\kappa\alpha} \sum_{l'\kappa'\beta} \Phi_{\alpha\beta}(l\kappa|l'\kappa') u_\alpha(l\kappa) u_\beta(l'\kappa') \\
 & + \frac{1}{6} \sum_{l\kappa\alpha} \sum_{l'\kappa'\beta} \sum_{l''\kappa''\gamma} \Phi_{\alpha\beta\gamma}(l\kappa|l'\kappa'|l''\kappa'') u_\alpha(l\kappa) u_\beta(l'\kappa') u_\gamma(l''\kappa'') \\
 & + \frac{1}{24} \sum_{l\kappa\alpha} \sum_{l'\kappa'\beta} \sum_{l''\kappa''\gamma} \sum_{l'''\kappa'''\delta} \Phi_{\alpha\beta\gamma\delta}(l\kappa|l'\kappa'|l''\kappa''|l'''\kappa''') u_\alpha(l\kappa) u_\beta(l'\kappa') u_\gamma(l''\kappa'') u_\delta(l'''\kappa''')
 \end{aligned}$$

A lo largo de los últimos 30 años, han existido muchos esfuerzos por tratar de entender los fenómenos anarmónicos. Como hemos mencionado, una de las principales líneas de investigación há sido abordar el problema mediante un enfoque perturbativo, en el cual las ecuaciones de movimiento de los átomos que forman al sistema son obtenidas usando la parte armónica del Hamiltoniano. Las partes anarmónicas se consideran pequeñas correcciones al comportamiento armónico. En los siguientes párrafos, mencionaremos algunos trabajos dedicados a estudiar la anarmonicidad en cristales con estructura de diamante, y daremos una breve descripción del contenido de dichos artículos.

En el trabajo de Maradudin y Fein [**Maradudin and Fein, 1962**], se obtiene la sección transversal diferencial de esparcimiento para neutrones térmicos coherentes incidiendo sobre un cristal anarmónico, así como las expresiones para el corrimiento en frecuencia y el ancho de línea (con contribuciones cúbicas y cuárticas), por lo cual este artículo se há convertido en referencia obligada para todo trabajo sobre anarmonicidad en cristales y experimentos de espectroscopía destinados a obtener valores para el corrimiento Δ y el ancho de línea Γ .

En 1965 Cowley [**Cowley, 1965**], utilizando los resultados de Maradudin y Fein, calcula el corrimiento en frecuencia Δ y el ancho de línea Γ . Para tal efecto, utiliza un modelo armónico de capas (**Shell Model**) para ajustar los datos de las frecuencias de modos normales.

La coincidencia entre los cálculos teóricos y los resultados experimentales resultó ser muy pobre debido a que dicho modelo de capas daba una descripción muy mala de las curvas de dispersión.

Así, en los años siguientes se publicaron diversos artículos sobre la materia, teniendo como denominador común la propuesta de un modelo de ajuste para las curvas de dispersión (Rigid Ion, Shell Model, Tight Binding, Bond Charge Model, Modelo de Wanser y Wallis) y cálculos de algunas propiedades anarmónicas como Δ y Γ .

En 1984, Menéndez y Cardona [**Menéndez and Cardona, 1984**], presentan resultados acerca de la dependencia en la temperatura del esparcimiento de primer orden en Si, Ge y α -Sn obteniendo, además, el ancho de línea.

En dicho trabajo, estos autores aseguran que el principal canal de decaimiento del fonón Raman estará dado por combinaciones de fonones ópticos y acústicos, en contraposición a Klemens [**Klemens, 1965**] quien proponía la descomposición en dos fonones longitudinal acústicos (**LA**) como principal canal de decaimiento del fonón Raman.

En un artículo publicado en 1986, Haro [**Haro et al, 1986**], [**Haro et al, 1982**] realiza una investigación teórica acerca de la constante de amortiguamiento y el corrimiento en frecuencia del fonón Raman en el silicio debido a interacciones anarmónicas cúbicas entre vecinos cercanos. En este trabajo, se utiliza el modelo de Wanser y Wallis para obtener las frecuencias de modo normal. El ajuste entre las curvas de dispersión experimentales y calculadas con el modelo resultó ser notablemente bueno. Adicionalmente, lleva a cabo un estudio sobre la dependencia en la temperatura del corrimiento en frecuencia y el ancho de línea comparándolos con datos experimentales. En este artículo, se muestra que el canal de decaimiento mas importante está dado por la combinación de ramas acústicas longitudinales y transversales (**LA-TA**), contrariamente a lo afirmado por Menéndez y Cardona.

En su tesis doctoral [**Haro, 1986b**], Haro estudia, tanto teórica como experimentalmente, la anarmonicidad en el silicio. En ese trabajo, calcula los coeficientes anarmónicos cúbicos para la estructura de diamante (en direcciones de alta simetría) considerando interacciones centrales de primeros hasta terceros vecinos. Cabe hacer notar que, anteriormente a este trabajo, no se habían obtenido expresiones analíticas para los coeficientes anarmónicos cúbicos. En cambio, se utilizaban aproximaciones como la de Peierls [**Peierls, 1965**], aun cuando era evidente que representaban una sobresimplificación del problema. Es importante señalar que el enfoque seguido por Haro es perturbativo, ya que se considera

que las correcciones al comportamiento armónico son pequeñas.

Más recientemente, Koval y Migoni [Koval and Migoni, 1994] presentan un trabajo en donde estudian la anarmonicidad en el silicio con el modelo de capas a la manera de Cowley, añadiendo interacciones entre las capas. En dicho trabajo, los autores estudian el corrimiento en frecuencia y el ancho de línea como funciones de la temperatura.

Algunos autores abordan el problema de describir al cristal anarmónico usando dinámicas moleculares y funciones de correlación, como es el caso de Wang [Wang et al, 1990]. Shobhana y Vanderbilt [Shobhana and Vanderbilt, 1994], en cambio, realizan un cálculo realista *ab-initio* de la contribución anarmónica cúbica al inverso del tiempo de vida del fonón Γ , y al corrimiento en frecuencia Δ en el silicio.

Uno de los objetivos principales de esta tesis es calcular los coeficientes anarmónicos cúbicos considerando interacciones centrales de primeros hasta quintos vecinos, así como el estudio de las curvas de dispersión del silicio y el germanio. La trascendencia de conocer los **CA** proviene de dos fuentes principales: la primera, porque deseamos establecer la existencia de relaciones entre **CA** pertenecientes a diferentes ramas (polarizaciones) para vecinos de orden impar, y mostrar, de paso, que aproximaciones como la de Peierls son inadecuadas para obtener esos coeficientes. La segunda fuente es que, para obtener Δ y Γ necesitamos conocer la magnitud de los **CA** a lo largo de direcciones de alta simetría (ver capítulo 4). A continuación, presentamos un breve adelanto del contenido de esta tesis.

En el primer capítulo, estudiaremos la aproximación armónica y las ecuaciones de movimiento de los átomos que forman la red. Asimismo, consideraremos el caso de interacciones centrales obteniendo una expresión que, más adelante, nos permitirá calcular los coeficientes anarmónicos cúbicos a lo largo de direcciones de alta simetría.

En el segundo capítulo, se calculan los coeficientes anarmónicos en direcciones de alta simetría ($[100]$, $[110]$, $[111]$), considerando interacciones de primeros, terceros y quintos vecinos; además, se muestra que existen relaciones entre los coeficientes anarmónicos correspondientes a órdenes impares.

En el capítulo 3, presentamos una breve y concisa revisión del modelo desarrollado – por Keith Herbert Wanser y Richard F. Wallis – para ajustar las curvas de dispersión del silicio y germanio. El modelo original de Wanser incluía contribuciones a la matriz dinámica de primeros hasta cuartos vecinos; como parte de este trabajo, se calculan las contribuciones a la matriz dinámica provenientes de los quintos vecinos.

En el cuarto capítulo, se estudia la respuesta del cristal ante una perturbación externa. Adicionalmente, se obtienen las expresiones teóricas para calcular el corrimiento en frecuencia Δ y el ancho de línea Γ .

En el capítulo 5, se presentan las curvas de dispersión del silicio y germanio ajustadas con el modelo de Wanser (cap. 3) en los casos de tres, cuatro y diez parámetros. También, numéricamente, se obtiene el ancho de línea utilizando dicho modelo.

En seguida, vertimos algunas conclusiones y analizamos las perspectivas a futuro de esta investigación. Al final de la tesis, se agrupan los apéndices matemáticos que contienen algunos desarrollos matemáticos no incluidos en el texto principal o que bosquejan derivaciones alternativas de resultados presentados en el mismo.

CAPÍTULO 1

APROXIMACIÓN ARMÓNICA Y DINÁMICA DE LA RED

1.1 INTRODUCCIÓN

En este capítulo, introducimos el formalismo necesario para estudiar las vibraciones de una red. En la sección [1.2], describimos la estructura del diamante en función de los vectores primitivos de la celda unitaria. Definimos, también, la red recíproca y la primera zona de Brillouin. En las secciones [1.3] y [1.4], obtenemos las ecuaciones de movimiento del sistema, los coeficientes anarmónicos en su expresión más general, así como la relación de dispersión que satisfacen las eigenfrecuencias $\omega(\kappa; \mathbf{q}, j)$ y los eigenvectores $\mathbf{e}(\kappa; \mathbf{q}, j)$. En la última sección del capítulo, se discute el caso particular de las interacciones centrales, obteniéndose una expresión que, mas adelante, nos permitirá calcular los coeficientes anarmónicos en direcciones de alta simetría para dichas interacciones.

1.2 DESCRIPCIÓN DE LA ESTRUCTURA DE DIAMANTE

La estructura de diamante puede describirse como una red cúbica centrada en las caras (**FCC**) con una base formada por dos átomos por celda unitaria. Esta estructura puede visualizarse como dos redes **FCC** interpenetradas, con una de ellas desplazada una distancia de $\frac{a}{4}$ sobre la diagonal principal de la otra celda (figuras 1.1 y 1.2).

Los vectores de la red que ubican a los átomos en sus posiciones de equilibrio están dados por [Wanser, 1982]

$$\mathbf{R}(l\kappa) = \mathbf{R}(l) + \mathbf{R}(\kappa) \quad (1.2.1)$$

en donde

$$\mathbf{R}(l) = l_1 \mathbf{a}_1 + l_2 \mathbf{a}_2 + l_3 \mathbf{a}_3 \quad (1.2.2)$$

son los vectores de la red de Bravais, y

$$\mathbf{R}(\kappa) = \frac{\kappa(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3)}{4} \quad (1.2.3)$$

son los vectores base, con $\kappa = 0, 1$; los enteros l_1, l_2, l_3 son totalmente arbitrarios. En las expresiones anteriores, l denota a la l -ésima celda y κ etiqueta al átomo dentro de la celda (como ésta posee dos átomos, κ toma los valores 0 y 1). Las relaciones entre los vectores primitivos \mathbf{a}_i y los vectores unitarios cartesianos \mathbf{e}_i son

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a(\hat{\mathbf{e}}_1 + \hat{\mathbf{e}}_2)}{2} \quad (1.2.4 \text{ a})$$

$$\mathbf{a}_2 = \frac{a(\hat{\mathbf{e}}_2 + \hat{\mathbf{e}}_3)}{2} \quad (1.2.4 \text{ b})$$

$$\mathbf{a}_3 = \frac{a(\hat{\mathbf{e}}_1 + \hat{\mathbf{e}}_3)}{2} \quad (1.2.4 \text{ c})$$

La constante de la red, a , tiene un valor de 5.43 \AA para el silicio, en tanto que para el germanio es de 5.65 \AA a la temperatura de $300^\circ K$ [Kittel, 1976]. De esta manera, usando (1.2.1)—(1.2.4), obtenemos

$$\mathbf{R}(l\kappa) = \frac{a[(l_1 + l_3 + \kappa/2)\hat{\mathbf{e}}_1 + (l_1 + l_2 + \kappa/2)\hat{\mathbf{e}}_2 + (l_2 + l_3 + \kappa/2)\hat{\mathbf{e}}_3]}{2} \quad (1.2.5)$$

además, el volumen de la celda primitiva es

$$\begin{aligned} \Omega_0 &= |\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)| \\ &= \frac{a^3}{4} \end{aligned}$$

y, la densidad del cristal es igual a

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{2M}{\Omega_0} \\ &= \frac{8M}{a^3} \end{aligned}$$

siendo M la masa del átomo.

La red recíproca de la FCC es la BCC [Ashcroft, 1982]. Los vectores de la red recíproca son

$$\mathbf{G} = m_1 \mathbf{b}_1 + m_2 \mathbf{b}_2 + m_3 \mathbf{b}_3, \quad \text{con } m_i \text{ enteros} \quad (1.2.6)$$

los vectores \mathbf{a}_i y \mathbf{b}_i cumplen las siguientes relaciones:

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi(\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}{c} \quad (1.2.7 \text{ a})$$

$$\mathbf{b}_2 = \frac{2\pi(\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1)}{c} \quad (1.2.7 \text{ b})$$

$$\mathbf{b}_3 = \frac{2\pi(\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2)}{c} \quad (1.2.7 \text{ c})$$

$$c = \mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3) \quad (1.2.7 \text{ d})$$

usando las ecuaciones (1.2.4) y (1.2.7), podemos escribir a los vectores \mathbf{b}_i como

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi(\hat{\mathbf{e}}_1 + \hat{\mathbf{e}}_2 - \hat{\mathbf{e}}_3)}{a} \quad (1.2.8 \text{ a})$$

$$\mathbf{b}_2 = \frac{2\pi(-\hat{\mathbf{e}}_1 + \hat{\mathbf{e}}_2 + \hat{\mathbf{e}}_3)}{a} \quad (1.2.8 \text{ b})$$

$$\mathbf{b}_3 = \frac{2\pi(\hat{\mathbf{e}}_1 - \hat{\mathbf{e}}_2 + \hat{\mathbf{e}}_3)}{a} \quad (1.2.8 \text{ c})$$

así, sustituyendo lo anterior, los vectores primitivos de la red recíproca están dados por

$$\mathbf{G} = \frac{2\pi[(m_1 - m_2 + m_3)\hat{\mathbf{e}}_1 + (m_1 + m_2 - m_3)\hat{\mathbf{e}}_2 + (-m_1 + m_2 + m_3)\hat{\mathbf{e}}_3]}{a} \quad (1.2.9)$$

y, como se demuestra en los cursos elementales de Estado Sólido [Ashcroft, 1982], el volumen de la celda primitiva de dicha red es

$$\frac{(2\pi)^3}{\Omega_0}$$

A esta celda de volumen mínimo se le conoce como "Primera Zona de Brillouin"; esta zona es la celda de Wigner-Seitz en el espacio recíproco (figura 1.3). En la figura 1.4, se muestran los cuatro primeros, doce terceros y doce quintos vecinos para la estructura del diamante. Los vectores de posición se encuentran en el artículo de Herman [Herman, 1959].

1.3 DINÁMICA DE LA RED

El Hamiltoniano vibracional de un cristal puede escribirse como [Maradudin and Horton, 1973] :

$$\begin{aligned} H = & \sum_{l\kappa\alpha} \frac{P_\alpha^2(l\kappa)}{2M} + \frac{1}{2} \sum_{l\kappa\alpha} \sum_{l'\kappa'\beta} \Phi_{\alpha\beta}(l\kappa|l'\kappa') u_\alpha(l\kappa) u_\beta(l'\kappa') \\ & + \frac{1}{6} \sum_{l\kappa\alpha} \sum_{l'\kappa'\beta} \sum_{l''\kappa''\gamma} \Phi_{\alpha\beta\gamma}(l\kappa|l'\kappa'|l''\kappa'') u_\alpha(l\kappa) u_\beta(l'\kappa') u_\gamma(l''\kappa'') \\ & + \frac{1}{24} \sum_{l\kappa\alpha} \cdots \sum_{l'''\kappa'''\delta} \Phi_{\alpha\beta\gamma\delta}(l\kappa|l'\kappa'|l''\kappa''|l'''\kappa''') u_\alpha(l\kappa) u_\beta(l'\kappa') u_\gamma(l''\kappa'') u_\delta(l'''\kappa''') \end{aligned} \quad (1.3.1)$$

donde, el primer término corresponde a la energía cinética del cristal, siendo P_α la componente α del momento del átomo ($l\kappa$) ; el segundo término corresponde a la energía potencial, siendo u_α la componente α del desplazamiento del átomo ($l\kappa$) con respecto a la posición de equilibrio (ecuación (1.2.1)). También,

$$\Phi_{\alpha\beta}(l\kappa|l'\kappa') = \left. \frac{\partial^2 \Phi}{\partial u_\alpha(l\kappa) \partial u_\beta(l'\kappa')} \right|_0 \quad (1.3.2)$$

aquí, Φ es la energía potencial y es una función de los desplazamientos nucleares; el subíndice cero indica que las derivadas deben evaluarse con los átomos colocados en su posición de equilibrio. Las constantes $\Phi_{\alpha\beta}$, $\Phi_{\alpha\beta\gamma}$, $\Phi_{\alpha\beta\gamma\delta}$ en (1.3.1) se conocen como constantes de fuerza de segundo, tercero y cuarto orden, respectivamente. Los dos primeros términos de (1.3.1) corresponden al Hamiltoniano armónico H_0 , mientras que los términos restantes conforman al Hamiltoniano anarmónico H_A . Introduzcamos la transformación a coordenadas normales dada por [Maradudin and Horton, 1973]

$$\mathbf{u}(l\kappa) = \left(\frac{\hbar}{2MN} \right)^{1/2} \sum_{\mathbf{q}j} \frac{\mathbf{e}(\kappa|\mathbf{q}j)}{(\omega_{\mathbf{q}j})^{1/2}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}(l)} A_{\mathbf{q}j} \quad (1.3.3 a)$$

$$\mathbf{P}(l\kappa) = -i \left(\frac{\hbar M}{2N} \right)^{1/2} \sum_{\mathbf{q}j} (\omega_{\mathbf{q}j})^{1/2} \mathbf{e}(\kappa|\mathbf{q}j) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}(l)} B_{\mathbf{q}j} \quad (1.3.3 b)$$

donde $\omega_{\mathbf{q}j}$ es la frecuencia del modo normal con vector de onda \mathbf{q} e índice de rama j , N es el número de celdas unitarias en el cristal, M es la masa del átomo y $\mathbf{e}(\kappa|\mathbf{q}j)$ es el vector de polarización del modo normal. Los operadores $A_{\mathbf{q}j}$ y $B_{\mathbf{q}j}$ son combinaciones lineales de los operadores de creación y aniquilación de fonones

$$A_{\mathbf{q}j} = b_{\mathbf{q}j} + b_{-\mathbf{q}j}^\dagger \quad (1.3.4 \text{ a})$$

$$B_{\mathbf{q}j} = b_{\mathbf{q}j} - b_{-\mathbf{q}j}^\dagger \quad (1.3.4 \text{ b})$$

Aplicando tal transformación, diagonalizamos al Hamiltoniano armónico H_0 y expresamos a los términos cúbico y cuártico del Hamiltoniano anarmónico en función de coeficientes anarmónicos de esos órdenes. De este modo, obtenemos [Apéndice A]

$$H_0 = \sum_{\mathbf{q}j} \hbar\omega_{\mathbf{q}j} \left(b_{\mathbf{q}j}^\dagger b_{\mathbf{q}j} + 1/2 \right) \quad (1.3.5 \text{ a})$$

$$\begin{aligned} H_A = & \sum_{\mathbf{q}j, \mathbf{q}'j', \mathbf{q}''j''} V(\mathbf{q}j|\mathbf{q}'j'|\mathbf{q}''j'') A_{\mathbf{q}j} A_{\mathbf{q}'j'} A_{\mathbf{q}''j''} \\ & + \sum_{\mathbf{q}j, \dots, \mathbf{q}'''j'''} V(\mathbf{q}j|\mathbf{q}'j'|\mathbf{q}''j''|\mathbf{q}'''j''') A_{\mathbf{q}j} A_{\mathbf{q}'j'} A_{\mathbf{q}''j''} A_{\mathbf{q}'''j'''} \end{aligned} \quad (1.3.5 \text{ b})$$

donde, los coeficientes anarmónicos cúbicos y cuárticos son

$$\begin{aligned} V(\mathbf{q}j|\mathbf{q}'j'|\mathbf{q}''j'') = & \frac{N}{6} \left(\frac{\hbar}{2NM} \right)^{3/2} (\omega_{\mathbf{q}j}\omega_{\mathbf{q}'j'}\omega_{\mathbf{q}''j''})^{-1/2} \Delta(\mathbf{q} + \mathbf{q}' + \mathbf{q}'') \\ & \times \sum_{l\kappa\alpha} \sum_{l'\kappa'\beta} \sum_{l''\kappa''\gamma} \Phi_{\alpha\beta\gamma}(0\kappa|l'\kappa'|l''\kappa'') e_\alpha(\kappa|\mathbf{q}j) e_\beta(\kappa|\mathbf{q}'j') \\ & \times e_\gamma(\kappa|\mathbf{q}''j'') e^{i[\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}(l)+\mathbf{q}'\cdot\mathbf{R}(l')+\mathbf{q}''\cdot\mathbf{R}(l'')]} \end{aligned} \quad (1.3.6)$$

$$\begin{aligned} V(\mathbf{q}j|\mathbf{q}'j'|\mathbf{q}''j''|\mathbf{q}'''j''') = & \frac{N}{24M^2} \left(\frac{\hbar}{2N} \right)^{3/2} (\omega_{\mathbf{q}j}\omega_{\mathbf{q}'j'}\omega_{\mathbf{q}''j''}\omega_{\mathbf{q}'''j'''})^{-1/2} \Delta(\mathbf{q} + \mathbf{q}' + \mathbf{q}'' + \mathbf{q}''') \\ & \times \sum_{l\kappa\alpha} \dots \sum_{l'''\kappa'''\delta} \Phi_{\alpha\beta\gamma\delta}(0\kappa|l'\kappa'|l''\kappa''|l'''\kappa''') e_\alpha(\kappa|\mathbf{q}j) e_\beta(\kappa|\mathbf{q}'j') \\ & \times e_\gamma(\kappa|\mathbf{q}''j'') e_\delta(\kappa|\mathbf{q}'''j''') e^{i[\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}(l)+\mathbf{q}'\cdot\mathbf{R}(l')+\mathbf{q}''\cdot\mathbf{R}(l'')+\mathbf{q}'''\cdot\mathbf{R}(l''')]} \end{aligned}$$

En la expresión anterior, debido a la invariancia traslacional de la red, podemos sustituir l por $l - l'$ en el argumento de las constantes de fuerza. Si, en particular, tomamos $l = l'$, el primer argumento de las constantes de fuerza será $l - l = 0$. Por esta razón, aparecen las constantes $\Phi_{\alpha\beta\gamma}(0\kappa|l'\kappa'|l''\kappa'')$.

1.4 ECUACIONES DE MOVIMIENTO Y VIBRACIÓN DE LA RED

Utilizando la parte armónica del Hamiltoniano (ya que consideraremos que los términos cúbico y cuártico son menores en orden con respecto a los términos armónicos,

razón por la cual serán tratados como perturbaciones), se obtienen las ecuaciones de movimiento, a partir de un tratamiento clásico usando las ecuaciones de Hamilton. Es importante hacer notar que, partiendo del formalismo cuántico, se obtienen las mismas ecuaciones [**Apéndice B**]. Así, las ecuaciones de movimiento de los átomos de la red son

$$M\ddot{u}_\alpha(l\kappa) = - \sum_{l'\kappa'} \Phi_{\alpha\beta}(l\kappa|l'\kappa')u_\beta(l'\kappa') \quad (1.4.1)$$

a continuación, proponemos la siguiente solución de modo normal

$$u_\alpha(l\kappa) = \frac{W_\alpha(\kappa)e^{i[\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}(l)-\omega t]}}{\sqrt{M}} \quad (1.4.2)$$

sustituyendo esta solución en (1.4.1), obtenemos

$$-\omega^2 W_\alpha(\kappa) = \sum_{\beta\kappa'} \left(\frac{1}{M} \sum_{l'} \Phi_{\alpha\beta}(l\kappa|l'\kappa')e^{-i\mathbf{q}\cdot[\mathbf{R}(l)-\mathbf{R}(l')]} \right) W_\beta(\kappa') \quad (1.4.3)$$

definiendo

$$D_{\alpha\beta}(\kappa\kappa'|\mathbf{q}) = \frac{1}{M} \sum_{l'} \Phi_{\alpha\beta}(l\kappa|l'\kappa')e^{-i\mathbf{q}\cdot[\mathbf{R}(l)-\mathbf{R}(l')]} \quad (1.4.4)$$

esta es la "primera forma de la matriz dinámica" y difiere de la segunda forma en un factor de fase. De este modo, obtenemos la relación

$$\omega^2 W_\alpha(\kappa) = \sum_{\beta\kappa'} D_{\alpha\beta}(\kappa\kappa'|\mathbf{q})W_\beta(\kappa') \quad (1.4.5)$$

por tanto, hemos reducido el problema de resolver el conjunto de ecuaciones de movimiento (1.4.1) – que son ecuaciones diferenciales de segundo orden acopladas – al problema de resolver un conjunto de $3r$ ecuaciones lineales algebraicas (r es el número de átomos por celda unitaria) en $3r$ incógnitas (las variables $W_\alpha(\kappa)$). Para que este conjunto de ecuaciones tenga una solución diferente de la trivial, se debe cumplir

$$\det (D_{\alpha\beta}(\kappa\kappa'|\mathbf{q}) - \omega^2\delta_{\alpha\beta}\delta_{\kappa\kappa'}) = 0 \quad (1.4.6)$$

Por esta condición, ω^2 debe satisfacer una ecuación de grado $3r$; las $3r$ soluciones de tal ecuación dependen de \mathbf{q} , el vector de onda, y del índice de rama j (óptica o acústica). Así, el conjunto $\omega^2(\mathbf{q}, j)$, $j = 1, 2, \dots, 3r$ contiene a los eigenvalores de $D_{\alpha\beta}(\kappa\kappa'|\mathbf{q})$. Ya que la matriz dinámica es hermitiana, sus eigenvalores son reales [**Arfken, 1970**]. Aún más, las eigenfrecuencias $\omega(\mathbf{q}, j)$ deben ser reales. Esto se debe a que, si las frecuencias fueran puramente imaginarias, las soluciones dadas por (1.4.2) decaerían de manera exponencial con respecto al tiempo. La relación expresada como

$$\omega = \omega(\mathbf{q}, j)$$

se conoce como **relación de dispersión**. En general, no es posible obtener expresiones cerradas para $\omega(\mathbf{q}, j)$, por lo que, en base a experimentos, se determinan las curvas de dispersión en direcciones de alta simetría usando, por ejemplo, esparcimiento de neutrones [Nilsson and Nelin, 1972]. Este punto será tratado con mayor amplitud en el capítulo 3.

1.5 CONSTANTES ATÓMICAS DE FUERZA E INTERACCIONES

DE CAMPO CENTRAL

Ahora, consideremos la aplicación a un caso concreto: las interacciones de campo central. En este caso, suponemos que los átomos interactúan por pares a través de una función potencial que depende únicamente de la magnitud de la separación entre dichos átomos. Si denotamos con $\varphi_{\kappa\kappa'}(r)$ a la función potencial de interacción de un átomo de tipo κ con un átomo de tipo κ' separados por una distancia r , entonces la energía potencial del cristal puede escribirse como

$$\Phi = \frac{1}{2} \sum_{l\kappa} \sum_{l'\kappa'}' \varphi_{\kappa\kappa'}(|r(l\kappa|l'\kappa')|) \quad (1.5.1)$$

aquí, $r(l\kappa|l'\kappa')$ es la distancia instantánea entre los átomos $(l\kappa)$ y $(l'\kappa')$; la prima sobre la suma indica que los términos con $(l\kappa) = (l'\kappa')$ deben suprimirse. El factor $\frac{1}{2}$ corrige el hecho de que cada interacción se cuenta dos veces. Si cada átomo del cristal sufre un desplazamiento $\mathbf{u}(l\kappa)$ a partir de su posición en reposo, entonces $r(l\kappa|l'\kappa')$ se puede expresar como

$$r(l\kappa|l'\kappa') = [x^2(l\kappa|l'\kappa') + 2\mathbf{x}(l\kappa) \cdot \mathbf{u}(l\kappa|l'\kappa') + u^2(l\kappa|l'\kappa')]^{1/2} \quad (1.5.2)$$

siendo

$$\mathbf{x}(l\kappa|l'\kappa') = \mathbf{x}(l\kappa) - \mathbf{x}(l'\kappa') \quad (1.5.3 \text{ a})$$

$$\mathbf{u}(l\kappa|l'\kappa') = \mathbf{u}(l\kappa) - \mathbf{u}(l'\kappa') \quad (1.5.3 \text{ b})$$

ahora, expandiendo la energía potencial en serie de potencias de las componentes $u_\alpha(l\kappa|l'\kappa')$, obtenemos

$$\begin{aligned} \Phi &= \frac{1}{2} \sum_{l\kappa} \sum_{l'\kappa'}' \varphi_{\kappa\kappa'}(|\mathbf{x}(l\kappa|l'\kappa')|) + \frac{1}{2} \sum_{l\kappa} \sum_{l'\kappa'}' \sum_{\alpha} \varphi_{\alpha}(l\kappa|l'\kappa') u_{\alpha}(l\kappa|l'\kappa') \\ &+ \frac{1}{4} \sum_{l\kappa} \sum_{l'\kappa'}' \sum_{\alpha\beta} \varphi_{\alpha\beta}(l\kappa|l'\kappa') u_{\alpha}(l\kappa|l'\kappa') u_{\beta}(l\kappa|l'\kappa') \\ &+ \frac{1}{12} \sum_{l\kappa} \sum_{l'\kappa'}' \sum_{\alpha\beta\gamma} \varphi_{\alpha\beta\gamma}(l\kappa|l'\kappa') u_{\alpha}(l\kappa|l'\kappa') u_{\beta}(l\kappa|l'\kappa') u_{\gamma}(l\kappa|l'\kappa') \end{aligned} \quad (1.5.4)$$

donde, los coeficientes de expansión son

$$\begin{aligned}\varphi_\alpha(l\kappa|l'\kappa') &= \left. \frac{\partial\varphi_{\kappa\kappa'}(r)}{\partial x_\alpha} \right|_{\mathbf{r}=\mathbf{x}(l\kappa|l'\kappa')} \\ &= \left. \frac{x_\alpha\varphi'_{\kappa\kappa'}(r)}{r} \right|_{\mathbf{r}=\mathbf{x}(l\kappa|l'\kappa')}\end{aligned}\quad (1.5.5 \text{ a})$$

$$\begin{aligned}\varphi_{\alpha\beta}(l\kappa|l'\kappa') &= \left. \frac{\partial^2\varphi_{\kappa\kappa'}(r)}{\partial x_\alpha\partial x_\beta} \right|_{\mathbf{r}=\mathbf{x}(l\kappa|l'\kappa')} \\ &= \left[\frac{x_\alpha x_\beta}{r^2} \left(\varphi''_{\kappa\kappa'}(r) - \frac{\varphi'_{\kappa\kappa'}(r)}{r} \right) + \frac{\delta_{\alpha\beta}\varphi'_{\kappa\kappa'}(r)}{r} \right] \Big|_{\mathbf{r}=\mathbf{x}(l\kappa|l'\kappa')}\end{aligned}\quad (1.5.5 \text{ b})$$

y, finalmente

$$\begin{aligned}\varphi_{\alpha\beta\gamma}(l\kappa|l'\kappa') &= \left[\frac{x_\alpha x_\beta x_\gamma}{r^3} \left(\varphi'''_{\kappa\kappa'}(r) - \frac{3\varphi''_{\kappa\kappa'}(r)}{r} + \frac{3\varphi'_{\kappa\kappa'}(r)}{r^2} \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{(x_\alpha\delta_{\beta\gamma} + x_\beta\delta_{\alpha\gamma} + x_\gamma\delta_{\alpha\beta})}{r^2} \left(\varphi''_{\kappa\kappa'}(r) - \frac{\varphi'_{\kappa\kappa'}(r)}{r} \right) \right] \Big|_{\mathbf{r}=\mathbf{x}(l\kappa|l'\kappa')}\end{aligned}\quad (1.5.5 \text{ c})$$

En este momento, abordaremos un punto muy importante: Encontraremos la relación entre las constantes de fuerza y las derivadas del potencial. Para lograrlo, tomemos la parte de primer orden en los desplazamientos de (1.5.4)

$$\Phi_1 = \frac{1}{2} \sum_{l\kappa} \sum_{l'\kappa'} \sum_{\alpha} \varphi_\alpha(l\kappa|l'\kappa') u_\alpha(l\kappa|l'\kappa') \quad (1.5.6)$$

que, usando (1.5.3), puede ser escrita como

$$\Phi_1 = \frac{1}{2} \sum_{l\kappa\alpha} \sum_{l'\kappa'} [\varphi_\alpha(l\kappa|l'\kappa') u_\alpha(l\kappa) - \varphi_\alpha(l\kappa|l'\kappa') u_\alpha(l'\kappa')]$$

intercambiando los índices mudos ($l\kappa$) y ($l'\kappa'$) en el segundo término del corchete, entonces

$$\Phi_1 = \frac{1}{2} \sum_{l\kappa\alpha} \sum_{l'\kappa'} [\varphi_\alpha(l\kappa|l'\kappa') - \varphi_\alpha(l'\kappa'|l\kappa)] u_\alpha(l\kappa)$$

pero, por definición

$$\varphi_\alpha(l\kappa|l'\kappa') = -\varphi_\alpha(l'\kappa'|l\kappa)$$

así que

$$\Phi_1 = \sum_{l\kappa\alpha} \sum_{l'\kappa'} \varphi_\alpha(l\kappa|l'\kappa') u_\alpha(l\kappa) \quad (1.5.7)$$

Ahora, tomemos la contribución a segundo orden en los desplazamientos de **(1.5.4)**

$$\Phi_2 = \frac{1}{4} \sum_{l\kappa\alpha} \sum_{l'\kappa'\beta} \varphi_{\alpha\beta}(l\kappa|l'\kappa') u_\alpha(l\kappa|l'\kappa') u_\beta(l\kappa|l'\kappa') \quad (1.5.8)$$

reescribiendo lo anterior como

$$\begin{aligned} \Phi_2 = \frac{1}{4} \sum_{l\kappa\alpha} \sum_{l'\kappa'\beta} \varphi_{\alpha\beta}(l\kappa|l'\kappa') [& u_\alpha(l\kappa) u_\beta(l\kappa) - u_\alpha(l\kappa) u_\beta(l'\kappa') \\ & - u_\alpha(l'\kappa') u_\beta(l\kappa) + u_\alpha(l'\kappa') u_\beta(l'\kappa')] \end{aligned}$$

e intercambiando índices mudos, obtenemos

$$\Phi_2 = \frac{1}{2} \sum_{l\kappa\alpha} \sum_{l'\kappa'\beta} \varphi_{\alpha\beta}(l\kappa|l'\kappa') [u_\alpha(l\kappa) u_\beta(l\kappa) - u_\alpha(l\kappa) u_\beta(l'\kappa')]$$

pero, por otro lado

$$\Phi = \Phi_0 + \sum_{l\kappa\alpha} \Phi_\alpha(l\kappa) u_\alpha(l\kappa) + \frac{1}{2} \sum_{l\kappa\alpha} \sum_{l'\kappa'\beta} \Phi_{\alpha\beta}(l\kappa|l'\kappa') u_\alpha(l\kappa) u_\beta(l\kappa) \quad (1.5.9)$$

comparando, obtenemos las relaciones deseadas

$$\Phi_\alpha(l\kappa) = \sum_{l'\kappa'} \varphi_\alpha(l\kappa|l'\kappa') \quad (1.5.10 \text{ a})$$

$$\Phi_{\alpha\beta}(l\kappa|l'\kappa') = -\varphi_{\alpha\beta}(l\kappa|l'\kappa') \quad \text{para} \quad (l\kappa) \neq (l'\kappa') \quad (1.5.10 \text{ b})$$

$$\Phi_{\alpha\beta}(l\kappa|l\kappa) = \sum_{l'\kappa'} \varphi_{\alpha\beta}(l\kappa|l'\kappa') \quad (1.5.10 \text{ c})$$

Finalmente, sustituyendo la parte de tercer orden de **(1.5.4)** en **(1.3.6)**, encontramos la expresión que nos permitirá calcular los coeficientes anarmónicos en direcciones de alta simetría para la estructura de diamante [**Apéndice C**]

$$\begin{aligned} V(\mathbf{q}j|\mathbf{q}'j'|\mathbf{q}''j'') &= \frac{N}{12} \left(\frac{\hbar}{2NM} \right)^{3/2} (\omega_{\mathbf{q}j} \omega_{\mathbf{q}'j'} \omega_{\mathbf{q}''j''})^{-1/2} \Delta(\mathbf{q} + \mathbf{q}' + \mathbf{q}'') \\ &\sum_{l\kappa l' i} \sum_{\alpha\beta\gamma} \Phi_{\alpha\beta\gamma}(l\kappa|l'\kappa') [e_\alpha(\kappa|\mathbf{q}j) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}(l)} - e_\alpha(\kappa'|\mathbf{q}j) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}(l')}] \\ &[e_\beta(\kappa|\mathbf{q}'j') e^{i\mathbf{q}'\cdot\mathbf{R}(l)} - e_\beta(\kappa'|\mathbf{q}'j') e^{i\mathbf{q}'\cdot\mathbf{R}(l')}] \\ &[e_\gamma(\kappa|\mathbf{q}''j'') e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}(l)} - e_\gamma(\kappa'|\mathbf{q}''j'') e^{i\mathbf{q}''\cdot\mathbf{R}(l')}] \quad (1.5.11) \end{aligned}$$

En el siguiente capítulo, utilizaremos **(1.5.11)** para calcular los canales de decaimiento del fonón de centro de zona (fonón Raman); consideraremos interacciones de primeros, terceros y quintos vecinos. Asimismo, mostraremos que se satisfacen ciertas relaciones para coeficientes anarmónicos pertenecientes a ramas con diferentes polarizaciones.

CAPÍTULO 2

COEFICIENTES ANARMÓNICOS EN DIRECCIONES DE ALTA SIMETRÍA

2.1 INTRODUCCIÓN

En este capítulo, obtendremos los coeficientes anarmónicos cúbicos (**CA**) en direcciones de alta simetría, considerando interacciones de primeros, terceros y quintos vecinos. Nuestro interés estará centrado en estudiar la desintegración del fonón Raman en dos fonones (proceso cúbico); en este proceso, se conserva la energía y el momento. Finalmente, como habíamos anticipado, encontraremos relaciones entre los **CA** correspondientes a diferentes polarizaciones del fonón Raman.

2.2 ANARMONICIDAD EN CRISTALES CON ESTRUCTURA DE DIAMANTE

En esta tesis, nos interesa estudiar la desintegración del fonón óptico de centro de zona en dos fonones. En este proceso se conserva la energía y el momento. Dado que el fonón Raman tiene vector de onda nulo, las leyes de conservación de energía y momento se escriben como

$$\omega_{\mathbf{q}'j'} + \omega_{\mathbf{q}''j''} = \omega_{\mathbf{0}j} \quad (2.2.1)$$

$$\mathbf{q}' + \mathbf{q}'' = \mathbf{0} \quad (2.2.2)$$

esto indica que la suma de las frecuencias de los fonones involucrados en el decaimiento del fonón Raman debe ser igual a la de éste y que los momentos de dichos fonones han de ser iguales en magnitud pero de sentido opuesto. Usando la conservación del momento (ecuación (2.2.2)), los **CA** (ecuación (1.5.11)) están dados por

$$\begin{aligned} V^{(i)}(\mathbf{0}j|\mathbf{q}j' - \mathbf{q}j'') &= \frac{N}{12} \left(\frac{\hbar}{2NM} \right)^{3/2} (\omega_{\mathbf{0}j}\omega_{\mathbf{q}j'}\omega_{-\mathbf{q}j''})^{-1/2} \sum_{\alpha\beta\gamma} \sum_{l'\kappa\kappa'} \Phi_{\alpha\beta\gamma}^{(i)}(l\kappa|l'\kappa') \\ &\times [e_{\alpha}(\kappa|\mathbf{0}j) - e_{\alpha}(\kappa'|\mathbf{0}j)] [e_{\beta}(\kappa|\mathbf{q}j') - e_{\beta}(\kappa'|\mathbf{q}j')e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}(l'')}] \\ &\times [e_{\gamma}(\kappa|-\mathbf{q}j'') - e_{\gamma}(\kappa'|-\mathbf{q}j'')e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}(l'')}] \end{aligned} \quad (2.2.3)$$

En la estructura del diamante, los vecinos de orden par pertenecen a la misma sub-red, en tanto que los vecinos de orden impar pertenecen a distintas sub-redes (figura 2). Fijando nuestra atención en el factor

$$[e_{\alpha}(\kappa|\mathbf{0}j) - e_{\alpha}(\kappa'|\mathbf{0}j)] \quad (2.2.4)$$

que aparece en (2.2.3), observamos que, para vecinos de orden par, se cumple $\kappa = \kappa'$. Por tanto

$$[e_{\alpha}(\kappa|\mathbf{0}j) - e_{\alpha}(\kappa|\mathbf{0}j)] = 0$$

así

$$V^{2n}(\mathbf{0}j|\mathbf{q}j' - \mathbf{q}j'') = 0 \quad (2.2.5)$$

El factor (2.2.4) aparece siempre en las expresiones de orden superior. Entonces, (2.2.5) puede generalizarse para procesos de orden superior:

$$V^{2n}(\mathbf{0}j|\mathbf{q}'j'|\mathbf{q}''j''|\dots) = 0 \quad (2.2.6)$$

de esta manera, solo tenemos que calcular los **CA** para vecinos de orden impar. En el apéndice D, se encuentran los vectores de posición de los primeros, terceros y quintos vecinos. Las distancias de los primeros hasta quintos vecinos, en unidades de la constante de la red a , están dadas por [Herman, 1959]

$$\begin{aligned} r_1 &= \frac{\sqrt{3}a}{4} \\ r_3 &= \frac{\sqrt{11}a}{4} & r_2 &= \frac{\sqrt{2}a}{2} \\ r_5 &= \frac{\sqrt{19}a}{4} & r_4 &= a \end{aligned} \quad (2.2.7)$$

definamos

$$c_i = \frac{(a/4)^3}{r_i^3} \quad (2.2.7 \text{ a})$$

$$d_i = \frac{(a/4)}{r_i^2} \quad (2.2.7 \text{ b})$$

y

$$A_i = \Phi_i'''(r_i) - \frac{3\Phi_i''(r_i)}{r_i} + \frac{3\Phi_i'(r_i)}{r_i^2} \quad (2.2.8 \text{ a})$$

$$B_i = \Phi_i'' - \frac{\Phi_i'(r_i)}{r_i} \quad (2.2.8 \text{ b})$$

donde $i = 1, 3, 5$.

En las secciones [2.3] a [2.7] calcularemos los **CA** en direcciones de alta simetría. Debido a la dificultad matemática, en lugar de utilizar una expresión como (1.5.11), se "simplifica" el problema aproximando ésta en distintas formas. Una muy conocida es la llamada aproximación de Peierls [Peierls, 1962]. En dicha aproximación, los **CA** están dados por

$$V(\mathbf{q}j|\mathbf{q}'j'|\mathbf{q}''j'') = C(\omega_{\mathbf{q}j}\omega_{\mathbf{q}'j'}\omega_{\mathbf{q}''j''})^{1/2}$$

Claramente esta es una burda simplificación a (1.5.11), por lo que, en este trabajo, calcularemos los **CA** usando la expresión completa sin aproximaciones. La motivación para calcular los coeficientes proviene de dos fuentes: primera, porque el módulo al cuadrado de los coeficientes nos dá la probabilidad de decaimiento del fonón Raman en dos fonones de distintas ramas y, segunda, porque, como veremos en el capítulo 4, necesitamos conocer estos coeficientes para poder calcular el ancho de línea del fonón [Cowley, 1965]. En un estudio anterior [Haro, 1986], se muestra que los canales de decaimiento más importantes

para el fonón Raman son combinaciones de fonones acústicos longitudinales y transversales (**LA-LA**, **LA-TA**), así que estos canales serán estudiados en las secciones siguientes. Etiquetaremos a las ramas a lo largo de direcciones de alta simetría como sigue: $j = 1, 2, 3$ para las ramas TA1, TA2 y LA, respectivamente $j = 4, 5, 6$ para las ramas TO1, TO2 y LO.

2.3 DECAIMIENTO DEL FONÓN ÓPTICO EN DOS FONONES LA EN LA DIRECCIÓN [100]

La estructura de diamante presenta propiedades de simetría que han sido ampliamente estudiadas [Lax, 1973]. Usando Teoría de Grupos, Lax obtiene los eigenvectores de la matriz dinámica de la estructura de diamante en direcciones de alta simetría. En particular, los eigenvectores para los fonones **LA** a lo largo de la dirección **[100]** son [Lax, 1973]

$$\begin{aligned} e_{\alpha}(0|\mathbf{q3}) &= b\delta_{\alpha 1} \\ &= \frac{\delta_{\alpha 1}}{\sqrt{2}} \end{aligned} \quad (2.3.1 \text{ a})$$

$$\begin{aligned} e_{\alpha}(1|\mathbf{q3}) &= be^{iqa/4}\delta_{\alpha 1} \\ &= \frac{e^{iqa/4}\delta_{\alpha 1}}{\sqrt{2}} \end{aligned} \quad (2.3.1 \text{ b})$$

y el vector de onda es

$$\mathbf{q} = q\mathbf{e}_1 \quad (2.3.1 \text{ c})$$

sustituyendo (2.3.1 a)—(2.3.1 c) en (2.2.3), obtenemos

$$\begin{aligned} V^{(k)}(\mathbf{0}j|\mathbf{q3} - \mathbf{q3}) &= \frac{N}{8} \left(\frac{\hbar}{2NM} \right)^{3/2} (\omega_{RA}\omega_{LA}^2)^{-1/2} \sum_i \sum_{\alpha} \Phi_{\alpha 11}(0, 0|\delta_i, 1) \\ &\times \sin^2(\phi^i/2)[e_{\alpha}(0|\mathbf{0}j) - e_{\alpha}(1|\mathbf{0}j)] \end{aligned} \quad (2.3.2)$$

aquí, $k = 1, 3, 5$.

PRIMEROS VECINOS

En este caso, la ecuación (2.3.2) se escribe como

$$\begin{aligned} V^{(1)}(\mathbf{0}j|\mathbf{q3} - \mathbf{q3}) &= \frac{N}{8} \left(\frac{\hbar}{2NM} \right)^{3/2} (\omega_{RA}\omega_{LA}^2)^{-1/2} \sum_{i=1}^4 \sum_{\alpha} \Phi_{\alpha 11}(0, 0|\delta_i, 1) \\ &\times \sin^2(\phi^i/2)[e_{\alpha}(0|\mathbf{0}j) - e_{\alpha}(1|\mathbf{0}j)] \end{aligned} \quad (2.3.3)$$

con

$$\phi^i = \frac{qa}{4} + \mathbf{q} \cdot \delta_i \quad (2.3.4)$$

en donde

$$\begin{aligned}\delta_1 &= \mathbf{0} & \delta_2 &= -\mathbf{a}_1 \\ \delta_3 &= -\mathbf{a}_2 & \delta_4 &= -\mathbf{a}_3\end{aligned}\quad (2.3.5)$$

siendo \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 , \mathbf{a}_3 los vectores primitivos de la estructura de diamante. Usando las tablas de constantes de fuerza que aparecen en el apéndice D, encontramos que

$$V^{(1)}(\mathbf{0}j|\mathbf{q}3| - \mathbf{q}3) = 0 \quad j = 4, 5, 6 \quad (2.3.6)$$

TERCEROS VECINOS

Aquí, usamos la ecuación (2.3.2) con la suma sobre $i = 1, \dots, 12$, ya que hay 12 terceros vecinos. También

$$\phi^i = \frac{qa}{4} + \mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\tau}_i \quad (2.3.7)$$

donde

$$\begin{aligned}\tau_1 &= \mathbf{a}_3 - \mathbf{a}_1 & \tau_7 &= \mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_3 \\ \tau_2 &= \mathbf{a}_3 - \mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2 & \tau_8 &= \mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2 \\ \tau_3 &= \mathbf{a}_3 - \mathbf{a}_2 & \tau_9 &= \mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_3 \\ \tau_4 &= \mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1 & \tau_{10} &= -\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_3 \\ \tau_5 &= \mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_3 & \tau_{11} &= -\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_3 \\ \tau_6 &= \mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_3 & \tau_{12} &= -\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2\end{aligned}\quad (2.3.8)$$

usando las tablas del apéndice D, obtenemos

$$V^{(3)}(\mathbf{0}j|\mathbf{q}3| - \mathbf{q}3) = 0 \quad j = 4, 5, 6 \quad (2.3.9)$$

QUINTOS VECINOS

Los **CA** para quintos vecinos pueden ser calculados mediante la expresión

$$\begin{aligned}V^{(5)}(\mathbf{0}j|\mathbf{q}3| - \mathbf{q}3) &= \frac{N}{6} \left(\frac{\hbar}{2NM} \right)^{3/2} (\omega_{RA}\omega_{LA}^2)^{-1/2} \sum_{i=1}^{12} \sum_{\alpha} \Phi_{\alpha 11}(0, 0|\rho_i, 1) \\ &\quad \times \sin^2(\phi^i/2)[e_{\alpha}(0|\mathbf{0}j) - e_{\alpha}(1|\mathbf{0}j)]\end{aligned}$$

con

$$\phi^i = \frac{qa}{4} + \mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\rho}_i \quad (2.3.10)$$

y

$$\begin{aligned}\rho_1 &= \mathbf{a}_1 & \rho_7 &= \mathbf{a}_1 - 2\mathbf{a}_2 \\ \rho_2 &= \mathbf{a}_2 & \rho_8 &= \mathbf{a}_1 - 2\mathbf{a}_3 \\ \rho_3 &= \mathbf{a}_3 & \rho_9 &= 2\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2 \\ \rho_4 &= -2\mathbf{a}_1 & \rho_{10} &= -2\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2 \\ \rho_5 &= -2\mathbf{a}_2 & \rho_{11} &= \mathbf{a}_2 - 2\mathbf{a}_3 \\ \rho_6 &= -2\mathbf{a}_3 & \rho_{12} &= -2\mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3\end{aligned}\quad (2.3.11)$$

realizando las sumas con la ayuda de las tablas del apéndice D, se obtiene

$$V^{(5)}(\mathbf{0}j|\mathbf{q}3| - \mathbf{q}3) = 0 \quad j = 4, 5, 6 \quad (2.3.12)$$

Podemos resumir los resultados (2.3.4), (2.3.6) y (2.3.8) de la manera siguiente:

$$V^{(k)}(\mathbf{0}j|\mathbf{q}3| - \mathbf{q}3) = 0 \quad , k = 1, 2, 3 \quad ; j = 4, 5, 6 \quad (2.3.13)$$

De este modo, concluimos que el fonón Raman *no puede decaer en dos fonones LA en la dirección [100] considerando interacciones de primeros, terceros y quintos vecinos*. Más adelante, haciendo referencia a las curvas de dispersión del silicio y germanio, analizaremos estas relaciones de manera gráfica.

2.4 DECAIMIENTO DEL FONÓN ÓPTICO EN UN FONÓN LA Y UN TA EN LA DIRECCIÓN [100]

Los eigenvectores para fonones pertenecientes a la rama LA en la dirección [100] fueron dados en la sección anterior. Los eigenvectores para un fonón TA en dicha dirección son [LAX, 1973]

$$e_\alpha(0|\mathbf{q}2) = a(\delta_{\alpha 2} - \delta_{\alpha 3}) \quad (2.4.1 \text{ a})$$

$$e_\alpha(1|\mathbf{q}2) = b(\delta_{\alpha 2} - \delta_{\alpha 3})e^{iqa/4} \quad (2.4.1 \text{ b})$$

donde a y b son constantes de normalización ligadas entre sí por medio de la relación de ortonormalidad [Wallis et al, 1972]

$$\sum_{\kappa\alpha} e_\alpha(\kappa|\mathbf{q}j)e_\alpha^*(\kappa|\mathbf{q}) = 1 \quad (2.4.2)$$

o sea

$$a^2 + b^2 = \frac{1}{2}$$

adicionalmente, elegimos las siguientes polarizaciones para el fonón óptico

$$\begin{aligned} e_\alpha(0|\mathbf{0}4) &= \frac{\delta_{\alpha 1}}{\sqrt{2}} ; & e_\beta(0|\mathbf{0}5) &= \frac{\delta_{\beta 2}}{\sqrt{2}} ; & e_\gamma(0|\mathbf{0}6) &= \frac{\delta_{\gamma 3}}{\sqrt{2}} ; \\ e_\alpha(1|\mathbf{0}4) &= -\frac{\delta_{\alpha 1}}{\sqrt{2}} ; & e_\beta(1|\mathbf{0}5) &= -\frac{\delta_{\beta 2}}{\sqrt{2}} ; & e_\gamma(1|\mathbf{0}6) &= -\frac{\delta_{\gamma 3}}{\sqrt{2}} ; \end{aligned} \quad (2.4.3)$$

es decir, la rama $j = 4$ está polarizada en la dirección x , en tanto que la rama $j = 5$ está polarizada en la dirección y ; finalmente, $j = 6$ corresponde a la polarización z . Sustituyendo los eigenvectores (2.3.1) y (2.4.1), los CA se escriben

$$\begin{aligned} V^{(k)}(\mathbf{0}j|\mathbf{q}2| - \mathbf{q}3) &= \frac{N}{6\sqrt{2}} \left(\frac{\hbar}{2NM} \right)^{3/2} (\omega_{RA}\omega_{LA}\omega_{TA})^{-1/2} \sum_i \sum_\alpha (\Phi_{\alpha 21} - \Phi_{\alpha 31}) \\ &\times (a - be^{i\phi})(1 - e^{-i\phi}) [e_\alpha(0|\mathbf{0}j) - e_\alpha(1|\mathbf{0}j)] \end{aligned} \quad (2.4.4)$$

PRIMEROS VECINOS

En el caso de primeros vecinos

$$\phi^i = \frac{qa}{4} + \mathbf{q} \cdot \delta_i \quad (2.4.5)$$

aquí, los δ_i están dados por (2.3.5). Después de realizar las sumas y sustituir las polarizaciones (2.4.3), se obtienen las relaciones siguientes entre los coeficientes

$$V^{(k)}(\mathbf{04}|\mathbf{q2}| - \mathbf{q3}) = 0 \quad (2.4.6 \text{ a})$$

$$V^{(k)}(\mathbf{06}|\mathbf{q2}| - \mathbf{q3}) = -V^{(k)}(\mathbf{05}|\mathbf{q2}| - \mathbf{q3}) \quad (2.4.6 \text{ b})$$

como posteriormente se mostrará, estas relaciones son válidas para primeros, terceros y quintos vecinos ($k = 1, 3, 5$). Para primeros vecinos

$$\begin{aligned} V^{(1)}(\mathbf{05}|\mathbf{q2}| - \mathbf{q3}) &= \frac{N}{6} \left(\frac{\hbar}{2NM} \right)^{3/2} (\omega_{RA}\omega_{LA}\omega_{TA})^{-1/2} \{ [a - be^{iqa/4}] [1 - e^{-iqa/4}] \\ &\quad \times [-2d_1 B_1] + [a - be^{-iqa/4}] [1 - e^{iqa/4}] [4c_1 A_1 + 2d_1 B_1] \} \quad (2.4.7) \end{aligned}$$

las constantes c_1, A_1, d_1, B_1 se definen en (2.2.7) y (2.2.8).

TERCEROS VECINOS

Del mismo modo, calculemos los **CA** para interacciones de terceros vecinos; usando (2.4.4) y

$$\phi^i = \frac{qa}{4} + \mathbf{q} \cdot \tau_i \quad (2.4.8)$$

realizando las sumas, obtenemos para $j = 4$

$$V^{(3)}(\mathbf{04}|\mathbf{q2}| - \mathbf{q3}) = 0$$

y, para $j = 5$, se obtiene

$$\begin{aligned} V^{(3)}(\mathbf{05}|\mathbf{q2}| - \mathbf{q3}) &= \frac{N}{3\sqrt{2}} \left(\frac{\hbar}{2NM} \right)^{3/2} (\omega_{RA}\omega_{LA}\omega_{TA})^{-1/2} \\ &\quad \times \{ [a - be^{iqa/4}] [1 - e^{-iqa/4}] [-32c_3 A_3 - 4d_3 B_3] \\ &\quad + [a - be^{3iqa/4}] [1 - e^{-3iqa/4}] [-12c_3 A_3 - 6d_3 B_3] \\ &\quad + [a - be^{-iqa/4}] [1 - e^{iqa/4}] [8c_3 A_3 + 4d_3 B_3] \\ &\quad + [a - be^{-3iqa/4}] [1 - e^{3iqa/4}] [6d_3 B_3] \} \quad (2.4.9) \end{aligned}$$

además, se cumplen las ecuaciones (2.4.6). También, las constantes c_3, A_3, d_3, B_3 se definen en (2.2.7) y (2.2.8).

QUINTOS VECINOS

Para interacciones de quintos vecinos

$$\phi^i = \frac{qa}{4} + \mathbf{q} \cdot \rho_i \quad (2.4.10)$$

usando (2.4.4), encontramos que

$$V^{(5)}(04|\mathbf{q}2| - \mathbf{q}3) = \frac{N}{6} \left(\frac{\hbar}{2NM} \right)^{3/2} (\omega_{RA}\omega_{LA}\omega_{TA})^{-1/2} \sum_{i=1}^{12} (\Phi_{121} - \Phi_{131})(a - be^{i\phi}) \\ \times (1 - e^{-i\phi})(a - be^{i\phi})(1 - e^{-i\phi})$$

realizando las sumas, obtenemos

$$V^{(5)}(04|\mathbf{q}2| - \mathbf{q}3) = 0 \quad (2.4.11 \text{ a})$$

y, para $j = 5$

$$V^{(5)}(05|\mathbf{q}2| - \mathbf{q}3) = \frac{N}{3} \left(\frac{\hbar}{2NM} \right)^{3/2} (\omega_{RA}\omega_{LA}\omega_{TA})^{-1/2} \\ \times \left\{ [-12c_5A_5 - 6d_5B_5][a - be^{3iq/4}][1 - e^{-3iq/4}] \right. \\ - d_5B_5[a - be^{iq/4}][1 - e^{-iq/4}] \\ + [48c_5A_5 + 6d_5B_5][a - be^{-3iq/4}][1 - e^{3iq/4}] \\ \left. + [18c_5A_5 + d_5B_5][a - be^{-iq/4}][1 - e^{iq/4}] \right\} \quad (2.4.11 \text{ b})$$

las constantes c_5 , A_5 , d_5 , B_5 se definen en (2.2.7) y (2.2.8). También, se satisfacen las relaciones (2.4.6).

2.5 DECAIMIENTO DEL FONÓN ÓPTICO EN DOS FONONES LA EN LA DIRECCIÓN [111]

Nuevamente, de acuerdo con Lax, los eigenvectores para los fonones **LA** a lo largo de la dirección [111] están dados por

$$e_\alpha(0|\mathbf{q}3) = b(\delta_{\alpha 1} + \delta_{\alpha 2} + \delta_{\alpha 3}) \quad (2.5.1 \text{ a})$$

$$e_\alpha(1|\mathbf{q}3) = c(\delta_{\alpha 1} + \delta_{\alpha 2} + \delta_{\alpha 3})e^{i\sqrt{3}qa/4} \quad (2.5.1 \text{ b})$$

b y c son constantes de normalización relacionadas entre sí mediante la condición de normalización (2.4.2), que en este caso es

$$b^2 + c^2 = \frac{1}{3} \quad (2.5.2)$$

claramente, el vector de onda es

$$\mathbf{q} = \frac{q}{3}(\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_3) \quad (2.5.3)$$

sustituyendo (2.5.1) en (2.2.3), obtenemos

$$V^{(k)}(0j|\mathbf{q3}| - \mathbf{q3}) = \frac{N}{6} \left(\frac{\hbar}{2NM} \right)^{3/2} (\omega_{RA}\omega_{LA}^2)^{-1/2} \sum_i \sum_\alpha [\Phi_{\alpha11} + 2(\Phi_{\alpha12} + \Phi_{\alpha13} + \Phi_{\alpha23}) + \Phi_{\alpha22} + \Phi_{\alpha33}] [e_\alpha(0|\mathbf{0}j) - e_\alpha(1|\mathbf{0}j)] [1/3 - 2bccos\phi] \quad (2.5.4)$$

PRIMEROS VECINOS

Usando (2.5.4), donde

$$\phi^i = \frac{\sqrt{3}qa}{4} + \mathbf{q} \cdot \delta_i \quad (2.5.5)$$

y, si el fonón óptico está polarizado en la dirección x , se obtiene

$$V^{(1)}(04|\mathbf{q3}| - \mathbf{q3}) = \frac{N}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hbar}{2NM} \right)^{3/2} (\omega_{RA}\omega_{LA}^2)^{-1/2} \left[\left(\frac{1}{3} - 2bccos \left(\frac{\sqrt{3}qa}{4} \right) \right) (-3c_1A_1 - 3d_1B_1) + \left(\frac{1}{3} - 2bccos \left(\frac{\sqrt{3}qa}{12} \right) \right) \left(\frac{c_1A_1}{3} + 3d_1B_1 \right) \right] \quad (2.5.6)$$

para las polarizaciones y y z , los cálculos dan resultados idénticos. Así, resumiendo

$$\begin{aligned} V^{(k)}(04|\mathbf{q3}| - \mathbf{q3}) &= V^{(k)}(05|\mathbf{q3}| - \mathbf{q3}) \\ &= V^{(k)}(06|\mathbf{q3}| - \mathbf{q3}) \end{aligned} \quad (2.5.7)$$

en las ecuaciones anteriores, $k = 1, 3, 5$.

TERCEROS VECINOS

Mostraremos que, como habíamos anticipado, se cumple la relación (2.5.7) para interacciones de terceros vecinos. Partiendo de (2.5.4), donde

$$\phi^i = \frac{\sqrt{3}qa}{4} + \mathbf{q} \cdot \tau_i \quad (2.5.8)$$

y con la ayuda de las tablas del apéndice D, los coeficientes anarmónicos están dados por

$$\begin{aligned} V^{(3)}(04|\mathbf{q3}| - \mathbf{q3}) &= \frac{N}{3\sqrt{2}} \left(\frac{\hbar}{2NM} \right) (\omega_{RA}\omega_{LA}^2)^{-1/2} \left[\left(\frac{1}{3} - 2bccos \left(\frac{\sqrt{3}qa}{4} \right) \right) \right. \\ &\quad \times (-54c_3A_3 - 54d_3B_3) + \left(\frac{1}{3} - 2bccos \left(\frac{\sqrt{3}qa}{12} \right) \right) (c_3A_3 + 9d_3B_3) \\ &\quad \left. + \left(\frac{1}{3} - 2bccos \left(\frac{5\sqrt{3}qa}{12} \right) \right) (125c_3A_3 + 45d_3B_3) \right] \end{aligned} \quad (2.5.9)$$

por tanto, se satisfacen las ecuaciones (2.5.7).

QUINTOS VECINOS

De manera similar, de la ecuación (2.5.4), en donde

$$\phi^i = \frac{\sqrt{3}qa}{4} + \mathbf{q} \cdot \rho_i \quad (2.5.10)$$

y sustituyendo las distintas polarizaciones para el fonón óptico, se obtiene

$$\begin{aligned} V^{(5)}(\mathbf{04}|\mathbf{q3}| - \mathbf{q3}) &= \frac{2N}{3\sqrt{2}} \left(\frac{\hbar}{2NM} \right)^{3/2} (\omega_{RA}\omega_{LA}^2)^{-1/2} \left[\left(\frac{1}{3} - 2bccos\left(\frac{\sqrt{3}qa}{12}\right) \right) (c_5A_5 + 9d_5B_5) \right. \\ &\quad \left. - \left(\frac{1}{3} - 2bccos\left(\frac{7\sqrt{3}qa}{12}\right) \right) (109c_5A_5 + 9d_5B_5) \right] \end{aligned} \quad (2.5.11)$$

Para $j = 5, 6$ se obtienen resultados idénticos. Esto muestra que la *desintegración del fonón óptico en dos fonones LA a lo largo de la dirección [111] es igualmente probable para las tres polarizaciones de dicho fonón.*

2.6 DECAIMIENTO DEL FONÓN ÓPTICO EN UN FONÓN LA Y UN FONÓN TA EN LA DIRECCIÓN [111]

En la sección anterior, escribimos los eigenvectores para los fonones **LA** a lo largo de la dirección [111]. Los eigenvectores para los fonones **TA**, en esta dirección, son [**Lax, 1973**]

$$e_\alpha(0|\mathbf{q2}) = a(\delta_{\alpha1} - \delta_{\alpha2}) \quad (2.6.1 \text{ a})$$

$$e_\alpha(1|\mathbf{q2}) = d(\delta_{\alpha1} - \delta_{\alpha2})e^{i\sqrt{3}qa/4} \quad (2.6.1 \text{ b})$$

en donde, de acuerdo con la relación de ortonormalidad, se cumple

$$a^2 + d^2 = \frac{1}{2} \quad (2.6.2)$$

sustituyendo los eigenvectores, los **CA** pueden escribirse como

$$\begin{aligned} V^{(k)}(\mathbf{0j}|\mathbf{q2}| - \mathbf{q3}) &= \frac{N}{6} \left(\frac{\hbar}{2NM} \right)^{3/2} (\omega_{RA}\omega_{LA}\omega_{TA})^{-1/2} \sum_i \sum_\alpha [\Phi_{\alpha11} + \Phi_{\alpha13} - (\Phi_{\alpha22} + \Phi_{\alpha23})] \\ &\quad \times [e_\alpha(0|\mathbf{0j}) - e_\alpha(1|\mathbf{0j})] [a - de^{i\phi}] [b - ce^{-i\phi}] \end{aligned} \quad (2.6.3)$$

PRIMEROS VECINOS

En este caso, el factor de fase ϕ es igual a

$$\phi^i = \frac{\sqrt{3}qa}{4} + \mathbf{q} \cdot \delta_i \quad (2.6.4)$$

entonces, usando (2.6.3) y las tablas del apéndice D, encontramos las relaciones siguientes:

$$V^{(k)}(\mathbf{04}|\mathbf{q2}| - \mathbf{q3}) = -V^{(k)}(\mathbf{05}|\mathbf{q2}| - \mathbf{q3}) \quad (2.6.5 \text{ a})$$

$$V^{(k)}(\mathbf{06}|\mathbf{q2}| - \mathbf{q3}) = 0 \quad (2.6.5 \text{ b})$$

con

$$\begin{aligned} V^{(1)}(\mathbf{05}|\mathbf{q2}| - \mathbf{q3}) &= \frac{N}{3\sqrt{2}} \left(\frac{\hbar}{2NM} \right)^{3/2} (\omega_{RA}\omega_{LA}\omega_{TA})^{-1/2} \left[(ab + cd - ace^{-i\sqrt{3}qa/4} \right. \\ &\quad \left. - bde^{i\sqrt{3}qa/4})(-3d_1B_1) + (ab + cd - ace^{i\sqrt{3}qa/12} - bde^{-i\sqrt{3}qa/12}) \right. \\ &\quad \left. \times (4c_1A_1 + 3d_1B_1) \right] \end{aligned} \quad (2.6.6)$$

De esta manera, la probabilidad de decaimiento del fonón óptico es igual para las polarizaciones x y y ; mas aún, el fonón óptico polarizado en la dirección z no puede decaer en un fonón **LA** y en un **TA** a lo largo de la dirección **[111]**.

TERCEROS VECINOS

Del mismo modo, a partir de (2.6.3), calculamos los **CA** para interacciones de quintos vecinos. Para este caso, el factor de fase ϕ es

$$\phi^i = \frac{\sqrt{3}qa}{4} + \mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\tau}_i \quad (2.6.7)$$

realizando las sumas indicadas en (2.6.3), obtenemos

$$\begin{aligned} V^{(3)}(\mathbf{05}|\mathbf{q2}| - \mathbf{q3}) &= \frac{N}{3\sqrt{2}} \left(\frac{\hbar}{2NM} \right)^{3/2} (\omega_{RA}\omega_{LA}\omega_{TA})^{-1/2} \left\{ (ab + cd + ace^{i\sqrt{3}qa/4} \right. \\ &\quad \left. + bde^{-i\sqrt{3}qa/4})(72c_3A_3 + 18d_3B_3) + (ab + cd + ace^{-i\sqrt{3}qa/12} \right. \\ &\quad \left. + bde^{i\sqrt{3}qa/12})(-16c_3A_3 - 3d_3B_3) + (ab + cd + ace^{-5i\sqrt{3}qa/12} \right. \\ &\quad \left. + bde^{5i\sqrt{3}qa/12})(-20c_3A_3 - 15d_3B_3) \right\} \end{aligned} \quad (2.6.8)$$

También, se satisfacen las ecuaciones (2.6.5). De este modo, el canal de decaimiento del fonón óptico con polarización z está prohibido.

QUINTOS VECINOS

El factor de fase es igual a

$$\phi^i = \frac{\sqrt{3}qa}{4} + \mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\rho}_i \quad (2.6.9)$$

en la ecuación (2.6.3), sustituimos las polarizaciones del fonón Raman dadas en las ecuaciones (2.4.3). Después de realizar las sumas, encontramos que

$$\begin{aligned}
V^{(5)}(05|\mathbf{q}2| - \mathbf{q}3) = & \frac{N}{3\sqrt{2}} \left(\frac{\hbar}{2NM} \right)^{3/2} (\omega_{RA}\omega_{LA}\omega_{TA})^{-1/2} \left\{ (ab + cd + ace^{7i\sqrt{3}qa/4} \right. \\
& + bde^{-7i\sqrt{3}qa/4})(28c_5A_5 + 21d_5B_5) + (ab + cd + ace^{-7i\sqrt{3}qa/12} \\
& + bde^{7i\sqrt{3}qa/12})(-80c_5A_5 - 24d_5B_5)(ab + cd + ace^{-i\sqrt{3}qa/12} \\
& \left. + bde^{i\sqrt{3}qa/12})(-56c_5A_5 - 6d_5B_5) \right\} \quad (2.6.10)
\end{aligned}$$

además, son válidas las relaciones (2.6.5) considerando interacciones de quintos vecinos.

2.7 DECAIMIENTO DEL FONÓN ÓPTICO EN DOS FONONES \mathbf{TA}_z EN LA DIRECCIÓN [110]

La notación \mathbf{TA}_z significa que los fonones salientes estarán polarizados de manera perpendicular tanto al eje z como a la dirección del fonón incidente. De acuerdo con Lax, los eigenvectores son

$$e_\alpha(0|\mathbf{q}2) = b(\delta_{\alpha 1} - \delta_{\alpha 2}) \quad (2.7.1 \text{ a})$$

$$e_\alpha(1|\mathbf{q}2) = b(\delta_{\alpha 1} - \delta_{\alpha 2})e^{i\sqrt{2}qa/4} \quad (2.7.1 \text{ b})$$

por la relación de ortonormalidad

$$b^2 = \frac{1}{4} \quad (2.7.2)$$

entonces, sustituyendo los eigenvectores, podemos escribir a los \mathbf{CA} como

$$\begin{aligned}
V^{(k)}(0j|\mathbf{q}2| - \mathbf{q}2) = & \frac{N}{3} \left(\frac{\hbar}{2NM} \right)^{3/2} (\omega_{RA}\omega_{TA_z}^2)^{-1/2} \sum_i \sum_\alpha b^2 (\Phi_{\alpha 11} - 2\Phi_{\alpha 12} + \Phi_{\alpha 22}) \\
& \times \sin^2(\phi/2) [e_\alpha(0|0j) - e_\alpha(1|0j)] \quad (2.7.3)
\end{aligned}$$

donde

$$\mathbf{q} = \frac{q}{\sqrt{2}}(\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2)$$

PRIMEROS VECINOS

El factor de fase es

$$\phi^i = \frac{\sqrt{2}qa}{4} + \mathbf{q} \cdot \delta_i \quad (2.7.4)$$

por tanto, evaluando las sumas, encontramos las relaciones siguientes

$$V^{(k)}(\mathbf{04}|\mathbf{q2}| - \mathbf{q2}) = V^{(k)}(\mathbf{05}|\mathbf{q2}| - \mathbf{q2}) = 0 \quad (2.7.5)$$

y

$$\begin{aligned} V^{(1)}(\mathbf{06}|\mathbf{q2}| - \mathbf{q2}) &= -\frac{16Nb^2}{3\sqrt{2}} \left(\frac{\hbar}{2NM} \right)^{3/2} (\omega_{RA}\omega_{TA_z}^2)^{-1/2} \\ &\times d_1 B_1 \text{sen}^2 \left(\frac{qa}{4\sqrt{2}} \right) \end{aligned} \quad (2.7.6)$$

TERCEROS VECINOS

En este caso, el factor de fase está dado por

$$\phi^i = \frac{\sqrt{2}qa}{4} + \mathbf{q} \cdot \tau_i \quad (2.7.7)$$

entonces, realizando las sumas indicadas en (2.7.2), se obtienen las relaciones

$$\begin{aligned} V^{(3)}(\mathbf{06}|\mathbf{q2}| - \mathbf{q2}) &= \frac{2Nb^2}{3\sqrt{2}} \left(\frac{\hbar}{2NM} \right)^{3/2} \left\{ (-64c_3A_3 + 4d_3B_3) \text{sen}^2 \left(\frac{qa}{4\sqrt{2}} \right) \right. \\ &\left. + (16c_3A_3 + 8d_3B_3) \text{sen}^2 \left(\frac{qa}{2\sqrt{2}} \right) \right\} \end{aligned} \quad (2.7.8)$$

y, las ramas $j = 4$ y $j = 5$ satisfacen las ecuaciones (2.7.5).

QUINTOS VECINOS

Finalmente,

$$\phi^i = \frac{\sqrt{2}qa}{4} + \mathbf{q} \cdot \rho_i \quad (2.7.9)$$

usando (2.7.2) y las polarizaciones del fonón Raman (ecuaciones (2.4.3)), encontramos que:

$$\begin{aligned} V^{(5)}(\mathbf{06}|\mathbf{q2}| - \mathbf{q2}) &= \frac{2Nb^2}{3\sqrt{2}} \left(\frac{\hbar}{2NM} \right)^{3/2} (\omega_{RA}\omega_{TA_z}^2)^{-1/2} \left\{ (-4d_5B_5) \text{sen}^2 \left(\frac{3qa}{4\sqrt{2}} \right) \right. \\ &+ (-48c_5A_5 - 24d_5B_5) \text{sen}^2 \left(\frac{qa}{2\sqrt{2}} \right) \\ &\left. + (192c_5A_5 + 24d_5B_5) \text{sen}^2 \left(\frac{qa}{4\sqrt{2}} \right) \right\} \end{aligned} \quad (2.7.10)$$

los coeficientes anarmónicos asociados a las ramas $j = 4, 5$ son nulos, de tal modo que se cumplen las ecuaciones (2.7.5).

2.8 RESUMEN

En la sección anterior, calculamos los coeficientes anarmónicos en direcciones de alta simetría y, encontramos que, se cumplían relaciones entre las diferentes ramas correspondientes a distintas polarizaciones del fonón Raman. A manera de resumen, presentamos el siguiente breviarío de los resultados obtenidos :

DIRECCIÓN [100]

2 LA

$$V^{(k)}(\mathbf{0}_j|\mathbf{q}_3| - \mathbf{q}_3) = 0$$

LA-TA

$$V^{(k)}(\mathbf{0}_4|\mathbf{q}_2| - \mathbf{q}_3) = 0$$

$$|V^{(k)}(\mathbf{0}_5|\mathbf{q}_2| - \mathbf{q}_3)| = |V^{(k)}(\mathbf{0}_6|\mathbf{q}_2| - \mathbf{q}_3)|$$

2 TA

$$V^{(k)}(\mathbf{0}_5|\mathbf{q}_2| - \mathbf{q}_2) = V^{(k)}(\mathbf{0}_6|\mathbf{q}_2| - \mathbf{q}_2) = 0$$

DIRECCIÓN [111]

2 LA

$$V^{(k)}(\mathbf{0}_4|\mathbf{q}_3| - \mathbf{q}_3) = V^{(k)}(\mathbf{0}_5|\mathbf{0}_3| - \mathbf{q}_3) = V^{(k)}(\mathbf{0}_6|\mathbf{q}_3| - \mathbf{q}_3)$$

LA-TA

$$|V^{(k)}(\mathbf{0}_4|\mathbf{q}_2| - \mathbf{q}_3)| = |V^{(k)}(\mathbf{0}_5|\mathbf{q}_2| - \mathbf{q}_3)|$$

2 TA

$$V^{(k)}(\mathbf{0}_4|\mathbf{q}_2| - \mathbf{q}_2) = V^{(k)}(\mathbf{0}_5|\mathbf{q}_2| - \mathbf{q}_2)$$

DIRECCIÓN [110]

2TA_z

$$V^{(k)}(\mathbf{0}_4|\mathbf{q}_2| - \mathbf{q}_2) = V^{(k)}(\mathbf{0}_5|\mathbf{q}_2| - \mathbf{q}_2) = 0$$

En todo lo anterior, $j = 4, 5, 6$ y $k = 1, 2, 3$. En la figura (3.2) se presentan gráficas de los coeficientes anarmónicos; se grafica la magnitud del vector de onda contra la magnitud (o valor absoluto, ya que los **CA** son complejos) del coeficiente anarmónico. Esta regularidad en el comportamiento de los **CA** para interacciones de orden impar sugiere que podría encontrarse una fórmula que nos diera los coeficientes de orden impar (primeros, terceros, quintos, . . . vecinos) a lo largo de las direcciones de alta simetría. En el capítulo siguiente, haremos una breve revisión del modelo armónico y anarmónico de Wanser y Wallis, en los casos de cuatro y diez parámetros.

CAPÍTULO 3

MODELO DE WANSER–WALLIS

3.1 INTRODUCCIÓN

En este capítulo, haremos una breve revisión del modelo de Wanser y Wallis [**Wanser, 1982**] que contempla interacciones centrales de primeros vecinos, interacciones angulares e interacciones dipolares no locales. Primero, presentamos el modelo de diez parámetros y, a continuación, el modelo de cuatro parámetros en el caso de silicio y germanio. En esta tesis, incluimos interacciones centrales de quintos vecinos y calculamos las contribuciones a la matriz dinámica por parte de dichos quintos vecinos (esto no había sido realizado anteriormente a este trabajo). Todas las contribuciones anteriores corresponden a la parte armónica del modelo; en la parte final de este capítulo presentamos la parte anarmónica, que incluye términos anarmónicos cúbicos que pueden encontrarse por medio del ajuste de datos experimentales de las constantes elásticas.

3.2 MODELO ARMÓNICO

En esta sección, estudiaremos la parte armónica del modelo de Wanser y Wallis. Este modelo consta de interacciones de corto y largo alcance. Las interacciones de corto alcance consideradas son : centrales de primeros a cuartos vecinos y angulares (no centrales) entre primeros vecinos; como interacciones de largo alcance, incluiremos a las producidas entre dipolos no locales.

INTERACCIONES CENTRALES

La contribución armónica a la energía potencial del cristal es

$$\Phi_{2c}^{(i)} = \frac{1}{4} \sum_{l\kappa} \sum_{l'\kappa'} \Phi_{\alpha\beta}^{(i)}(l\kappa|l'\kappa') u_{\alpha}(l\kappa|l'\kappa') u_{\beta}(l\kappa|l'\kappa') \quad (3.2.1)$$

donde

$$\begin{aligned} \Phi_{\alpha\beta}^{(i)}(l\kappa|l'\kappa') = & \left[\frac{x_{\alpha}x_{\beta}}{r_i^2} (\Phi_i'(r) - \frac{1}{r_i} \Phi_i(r)) \right. \\ & \left. + \frac{\delta_{\alpha\beta}}{r_i} \Phi_i(r) \right] \Bigg|_{\mathbf{r}=\mathbf{R}(l\kappa|l'\kappa')} \end{aligned} \quad (3.2.2)$$

usando la ecuación anterior, calculamos las matrices de las constantes de fuerza (**APENDICE E**). Las contribuciones a la matriz dinámica debidas a interacciones de primeros a cuartos vecinos, están dadas por [**Wanser, 1982**]

$$D_{\alpha\beta}^{1^0}(0, 0|\mathbf{q}) = \frac{4\alpha}{M} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.2.3 \text{ a})$$

$$D_{\alpha\beta}^{1^0}(0, 1|\mathbf{q}) = -\frac{1}{M} \sum_{i=1}^4 \phi_{\alpha\beta}(0, 0|\delta_i, 1)e^{i\mathbf{q}\cdot\delta_i} \quad (3.2.3 \text{ b})$$

$$D_{\alpha\beta}^{2^0}(0, 1|\mathbf{q}) = 0 \quad (3.2.4 \text{ a})$$

$$D_{\alpha\beta}^{2^0}(0, 0|\mathbf{q}) = \frac{2}{M} \sum_{i=1}^6 \phi_{\alpha\beta}(0, 0|\mu_i, 0)[1 - \cos(\mathbf{q}\cdot\mu_i)] \quad (3.2.4 \text{ b})$$

$$\begin{aligned} D_{\alpha\beta}^{3^0}(0, 0|\mathbf{q}) &= \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{12} \phi_{\alpha\beta}(0, 0|\tau_i, 1) \\ &= \frac{(8\mu' + 4\lambda')}{M} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.2.5 \text{ a})$$

$$D_{\alpha\beta}^{3^0}(0, 1|\mathbf{q}) = -\frac{1}{M} \sum_{i=1}^{12} \phi_{\alpha\beta}(0, 0|\tau_i, 1)e^{i\mathbf{q}\cdot\tau_i} \quad (3.2.5 \text{ b})$$

$$D_{\alpha\beta}^{4^0}(0, 1|\mathbf{q}) = 0 \quad (3.2.6 \text{ a})$$

$$D_{\alpha\beta}^{4^0}(0, 0|\mathbf{q}) = \frac{2}{M} \sum_{i=1}^3 \phi_{\alpha\beta}(0, 0|\lambda_i, 0)[1 - \cos(\mathbf{q}\cdot\lambda_i)] \quad (3.2.6 \text{ b})$$

En su trabajo, Wanser no calcula las contribuciones de los quintos vecinos a la matriz dinámica, por lo que, en este punto, procedemos a obtenerlas. De la ec. (3.2.1)

$$\Phi_{2c} = \frac{1}{4} \sum_{l\kappa\alpha} \sum_{l'\kappa'\beta} \phi_{\alpha\beta}(l\kappa|l'\kappa') u_{\alpha}(l\kappa|l'\kappa') u_{\beta}(l\kappa|l'\kappa')$$

evaluamos la suma sobre los quintos vecinos (12 de ellos), obteniendo

$$\begin{aligned} \Phi_2^{5^0} &= \frac{1}{4} \sum_{l\alpha\beta} \sum_{i=1}^{12} [\phi_{\alpha\beta}(l, 0|l + \rho_i, 1) u_{\alpha}(l, 0|l + \rho_i, 1) u_{\beta}(l, 0|l + \rho_i, 1) \\ &\quad + \phi_{\alpha\beta}(l, 1|l + \rho_{i+12}, 0) u_{\alpha}(l, 1|l + \rho_{i+12}, 0) u_{\beta}(l, 1|l + \rho_{i+12}, 0)] \end{aligned} \quad (3.2.7)$$

los vectores de posición ρ_i están definidos en (2.3.11); además $\rho_{i+12} = -\rho_i$, para $1 \leq i \leq 12$. Usando las propiedades de traslación de la red y las propiedades de simetría, (3.2.7) se escribe

$$\begin{aligned} \Phi_2^{5^0} &= \frac{1}{4} \sum_{l\alpha\beta} \sum_{i=1}^{12} \phi_{\alpha\beta}(0, 0|\rho_i, 1) [u_{\alpha}(l, 0|l + \rho_i, 1) u_{\beta}(l, 0|l + \rho_i, 1) \\ &\quad + u_{\alpha}(l, 1|l - \rho_i, 0) u_{\beta}(l, 1|l - \rho_i, 0)] \end{aligned} \quad (3.2.8)$$

A partir de esta expresión, podemos calcular la contribución de los quintos vecinos a la matriz dinámica. Primero, debemos calcular las doce matrices $\phi_{\alpha\beta}(0, 0|\rho_i, 1)$. A partir de

su definición, calcularemos estas matrices usando la ec. **(3.2.2)**. Las matrices resultantes se encuentran en el apéndice E. Ahora, reescribamos la relación de dispersión **(1.4.5)** como

$$\sum_{\beta\kappa'} D_{\alpha\beta}(\kappa\kappa'|\mathbf{q})W_{\beta}(\kappa') = \left\{ \frac{1}{\sqrt{M}} \left[\frac{\partial\Phi_2}{\partial u_{\alpha}(l\kappa)} \right] e^{-i[\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}(l)+\omega t]} \right\} \quad (3.2.9)$$

y, las derivadas de la función potencial con respecto a los desplazamientos $u_{\alpha}(l\kappa)$, son

$$\frac{\partial\Phi_2^{5_0}}{\partial u_{\alpha}(l,0)} = \sum_{i=1}^{12} \sum_{\beta} \phi_{\alpha\beta}(0,0|\rho_i,1)u_{\beta}(l,0|l+\rho_i,1) \quad (3.2.10 \text{ a})$$

$$\frac{\partial\Phi_2^{5_0}}{\partial u_{\alpha}(l,1)} = \sum_{i=1}^{12} \sum_{\beta} \phi_{\alpha\beta}(0,0|\rho_i,1)u_{\beta}(l,1|l-\rho_i,1) \quad (3.2.10 \text{ b})$$

Así, de **(3.2.9)** y **(3.2.10)**, encontramos (para $\kappa = 0$)

$$\begin{aligned} \sum_{\beta} \left[D_{\alpha\beta}^{5_0}(0,0|\mathbf{q})W_{\beta}(0) + D_{\alpha\beta}^{5_0}(0,1|\mathbf{q})W_{\beta}(1) \right] &= \frac{1}{\sqrt{M}} e^{-i[\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}(l)-\omega t]} \\ &\times \sum_{\beta} \sum_{i=1}^{12} \phi_{\alpha\beta}(0,0|\rho_i,1)u_{\beta}(l,0|l+\rho_i,1) \end{aligned}$$

entonces, sustituyendo la solución de modo normal **(1.4.2)**, obtenemos

$$D_{\alpha\beta}^{5_0}(0,0|\mathbf{q}) = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{12} \phi_{\alpha\beta}(0,0|\rho_i,1) \quad (3.2.11 \text{ a})$$

$$D_{\alpha\beta}^{5_0}(0,1|\mathbf{q}) = \frac{-1}{M} \sum_{i=1}^{12} \phi_{\alpha\beta}(0,0|\rho_i,1)e^{i\mathbf{q}\cdot\rho_i} \quad (3.2.11 \text{ b})$$

finalmente, realizando la suma sobre todas las matrices de las constantes de fuerza, la contribución de los quintos vecinos a la matriz dinámica es

$$D_{\alpha\beta}^{5_0}(0,0|\mathbf{q}) = \frac{(8\mu''' + 4\lambda''')}{M} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.2.12)$$

donde

$$\mu''' = \frac{9}{19}\phi_5''(r_5) + \frac{10}{9r_5}\phi_5'(r_5)$$

y

$$\lambda''' = \frac{1}{19}\phi_5''(r_5) + \frac{18}{9r_5}\phi_5'(r_5)$$

INTERACCIONES ANGULARES

La contribución de las interacciones angulares a la energía potencial es [Wanser, 1982]

$$\Phi^a = \frac{1}{2} \sigma r_0^2 \sum_{l\kappa} \sum_{l'\kappa'} \sum_{l''\kappa''} \Delta\theta^2(l\kappa|l'\kappa'|l''\kappa'') \quad (3.2.13)$$

en donde $\Delta\theta(l\kappa|l'\kappa'|l''\kappa'')$ es el cambio angular entre los átomos $(l\kappa)$, $(l'\kappa')$, y $(l''\kappa'')$, siendo $(l\kappa)$ el átomo en el vértice y $(l'\kappa')$, $(l''\kappa'')$ los átomos primeros vecinos (fig. 3.1). Por esta razón, esta interacción involucra tres cuerpos; en la misma expresión, σ es la constante de fuerza angular. Además, el cambio angular está definido como

$$\Delta\theta(l\kappa|l'\kappa'|l''\kappa'') = \theta(l\kappa|l'\kappa'|l''\kappa'') - \theta^{(0)}(l\kappa|l'\kappa'|l''\kappa'')$$

el ángulo $\theta^{(0)}$ es el ángulo que forman los tres átomos en la configuración de equilibrio, y esta dado por

$$\cos\theta^{(0)} = -\frac{1}{3}$$

INTERACCIONES DE LARGO ALCANCE

Debido a que la red sufre desplazamientos, se distorsionan las densidades de carga en la vecindad del ión desplazado. Esta carga inducida interacciona electrostáticamente con alguna distorsión en la densidad de carga producida por otro átomo desplazado. Esto da lugar a las interacciones de largo alcance.

De acuerdo con Wanser [Wanser, 1982], la componente del momento dipolar del átomo $(l\kappa)$ (hasta términos lineales en los desplazamientos) es

$$p_\alpha(l\kappa) = \sum_{l'\kappa'\beta} p_{\alpha\beta}(l\kappa|l'\kappa') (u_\beta(l'\kappa') - u_\beta(l\kappa)) \quad (3.2.14)$$

donde $p_{\alpha\beta}(l\kappa|l'\kappa')$ es el tensor de momento dipolar no local.

Por tanto, la energía de interacción de un par de dipolos está dada por

$$W(l\kappa|l'\kappa') = \frac{1}{\epsilon_0} \sum_{\alpha\beta} \Omega_{\alpha\beta}(l\kappa|l'\kappa') p_\alpha(l\kappa) p_\beta(l'\kappa') \quad (3.2.15)$$

aquí, ϵ_0 es la constante dieléctrica y

$$\Omega_{\alpha\beta}(l\kappa|l'\kappa') = \frac{\delta_{\alpha\beta}}{|\mathbf{R}(l\kappa|l'\kappa')|^3} - \frac{3R_\alpha(l\kappa|l'\kappa')R_\beta(l\kappa|l'\kappa')}{|\mathbf{R}(l\kappa|l'\kappa')|^5} \quad (3.2.16)$$

por lo tanto, la energía total de interacción entre dipolos es la suma sobre todos los dipolos tomados por pares. Así, esta energía es

$$\Phi^{dd} = \frac{1}{2} \sum_{l\kappa} \sum_{l'\kappa'} W(l\kappa|l'\kappa') \quad (3.2.17)$$

Siguiendo a Wanser, las constantes elásticas y la frecuencia Raman se relacionan con las constantes de fuerza a través de las expresiones siguientes:

$$\begin{aligned}
aC_{11} &= \alpha + 4\sigma + 8\mu + 2\nu + 9\lambda' + 8\lambda'' \\
aC_{12} &= 2\beta - \alpha - 2\sigma + 8\nu - 4\mu - 4\lambda - 10\mu' \\
&\quad + 2\nu' - \lambda' + 12\delta' - 8\mu'' \\
aC_{44} &= \alpha + \frac{2}{3}\sigma + 4\mu + 4\lambda + \lambda' + 10\mu' + 8\mu'' \\
&\quad - \frac{(4\sigma/3 - \beta + 2\delta' + 3\nu')^2}{\alpha + 8\sigma/3 + 2\mu' + \lambda'} \\
\omega_{RA}^2 &= \frac{1}{M}(8\alpha + 64\sigma/3 + 16\mu' + 8\lambda')
\end{aligned}$$

usando los datos experimentales de las constantes elásticas y de las frecuencias (Raman y transversal acústica en el punto X de la primera zona de Brillouin), se obtienen los valores de los diez parámetros:

$$\begin{aligned}
\alpha &= 4.7008 \times 10^4 \\
\beta &= 3.0364 \times 10^4 \\
\mu &= 5.4455 \times 10^3 \\
\nu &= 4.7303 \times 10^3 \\
\sigma &= 4.3265 \times 10^3 \\
\mu' &= -2.2679 \times 10^3 \\
\nu' &= -80.545 \\
\lambda'' &= 99.978 \\
z_1 &= 0.804905 \\
z_2 &= -0.201226
\end{aligned}$$

como veremos en el cap. 5, la contribución de los dipolos no locales es esencial para obtener el abatimiento característico de las ramas transversales acústicas en las diferentes direcciones de alta simetría.

3.3 MODELO ANARMÓNICO

Este modelo es una extensión al modelo armónico presentado en la sección anterior. En el se incluyen constantes de fuerza anarmónicas cúbicas (que toman en cuenta los términos anarmónicos cúbicos en el Hamiltoniano) que pueden ser determinadas por medio del ajuste de las constantes elásticas de tercer orden, de los parámetros de Gruneisen o de otros valores experimentales. En este modelo, se consideran interacciones centrales de corto alcance (de primeros hasta cuartos vecinos), interacciones angulares y de dipolos no locales .

3.4 MODELO DE CUATRO PARÁMETROS

Como un ejemplo ilustrativo, mostraremos como se ajustan los parámetros del modelo de Wanser y Wallis para un caso sencillo: el modelo de cuatro parámetros del silicio y el germanio. En su tesis de Doctorado, Wanser obtiene las ecuaciones que relacionan a los datos experimentales (ω_{RA} , constantes elásticas, frecuencias a lo largo de direcciones de simetría) con las constantes de fuerza. Los parámetros ajustables son α , μ , σ , y $p_1 = z_1 e$ siendo e la carga del electrón; los datos experimentales son las frecuencias ω_{RA} y ω_{TAX} y las constantes elásticas C_{11} y C_{12} extraídas del artículo de McSkimin [McSkimin, 1954]. Las ecuaciones son:

$$8\alpha + \frac{64}{3}\sigma = M\omega_{RA}^2 \quad (3.4.1a)$$

$$8\mu + 12\sigma + 4\pi b p_1^2 = M\omega_{TAX}^2 \quad (3.4.1b)$$

$$\alpha + 4\mu - 2\sigma = aC_{12} \quad (3.4.1c)$$

$$\alpha + 8\mu + 4\sigma = aC_{11} \quad (3.4.1d)$$

la solución de este sistema de ecuaciones es

$$\alpha = \frac{3M\omega_{RA}^2 + 8a(2C_{12} - C_{11})}{32} \quad (3.4.2a)$$

$$\mu = \frac{8a(2C_{12} + 7C_{11}) - 9M\omega_{RA}^2}{512} \quad (3.4.2b)$$

$$\sigma = \frac{24a(C_{11} - C_{12}) + 3M\omega_{RA}^2}{256} \quad (3.4.2c)$$

$$p_1^2 = \frac{2a(C_{12} - C_{11}) + M\omega_{TAX}^2}{4\pi b} \quad (3.4.2d)$$

Como comprobación, calcularemos los cuatro parámetros para el silicio. Los datos disponibles son:

$$\begin{aligned} \omega_{RA} &= 9.8 \times 10^{13} \text{seg}^{-1} \\ \omega_{TAX} &= 2.8 \times 10^{13} \text{seg}^{-1} \\ a &= 5.43 \times 10^{-8} \text{cm} \\ M &= 4.66 \times 10^{-23} \text{g} \end{aligned}$$

los resultados obtenidos son

$$\begin{aligned} \alpha &= 3.676 \times 10^4 \text{dina/cm} \\ \mu &= 3.077 \times 10^3 \text{dina/cm} \\ \sigma &= 7.179 \times 10^3 \text{dina/cm} \\ p_1^2 &= 3.05 \times 10^3 \end{aligned}$$

que son los parámetros que aparecen en el trabajo de Wanser. Para el germanio, los datos

disponibles son [McSkimin, 1954]:

$$\begin{aligned}
 C_{11} &= 1.2897 \times 10^{12} \text{ dina/cm}^2 \\
 C_{12} &= 0.4834 \times 10^{12} \text{ dina/cm}^2 \\
 \omega_{RA} &= 5.7365 \times 10^{12} \text{ seg}^{-1} \\
 \omega_{TAX} &= 1.5079 \times 10^{12} \text{ seg}^{-1}
 \end{aligned}$$

Sustituyendo las constantes elásticas y las frecuencias en las ecuaciones (3.4.2), obtenemos los cuatro parámetros para el germanio:

$$\alpha = 3.2613177 \times 10^4 \text{ dina/cm} \quad (3.4.3a)$$

$$\mu = 1.8638722 \times 10^3 \text{ dina/cm} \quad (3.4.3b)$$

$$\sigma = 6.3601555 \times 10^3 \text{ dina/cm} \quad (3.4.3c)$$

$$p_1 = 0.472388691 \times 10^{-9} \quad (3.4.3d)$$

$$z_1 = \frac{p_1}{e} = 0.2474205438 \quad (3.4.3e)$$

En el capítulo 5, presentaremos las curvas de dispersión del germanio y silicio usando el modelo de cuatro parámetros, así como el ancho de línea calculado a cierta temperatura (también calcularemos el ancho de línea usando el modelo de diez parámetros en el caso del silicio).

CAPÍTULO 4

ANCHO DE LÍNEA

4.1 INTRODUCCIÓN

En este capítulo, estudiaremos la respuesta del cristal ante una perturbación externa. En particular, la perturbación puede ser un haz de neutrones térmicos coherentes o un experimento usando espectroscopía Raman. A continuación, encontramos las ecuaciones que nos permiten conocer al ancho de línea Γ , y el corrimiento en frecuencia Δ . Como veremos más adelante, estas expresiones serán calculadas de manera numérica. Este será el objetivo principal del capítulo 5.

4.2 RESPUESTA DEL CRISTAL ANTE UNA PERTURBACIÓN

En un cristal cuyos átomos interaccionan con fuerzas tipo *Ley de Hooke*, esto es, en un cristal cuya energía potencial se expande hasta términos cuadráticos en los desplazamientos de los átomos con respecto a sus posiciones de equilibrio, los movimientos de los átomos pueden expresarse como la superposición de las vibraciones de osciladores armónicos independientes, tantos como grados de libertad posea el cristal. Cada uno de estos modos independientes de vibración tienen su propia frecuencia característica que depende del vector de onda \mathbf{q} y del índice de la rama j (el cual especifica la polarización de la onda).

Si estudiamos al sólido dentro de la aproximación armónica usando, por ejemplo, esparcimiento de neutrones (*neutron scattering*), la sección transversal de esparcimiento del fonón, como función de la energía transferida, consiste de una colección de picos δ . Estos picos están centrados en las frecuencias $\omega(\mathbf{q}j)$. A partir de mediciones de los cambios en los momentos y energías de los neutrones – como resultado del proceso de esparcimiento – pueden construirse las curvas de dispersión $\omega = \omega(\mathbf{q}j)$.

Sin embargo, ningún cristal es perfectamente armónico ya que, como vimos en el capítulo 1, si mantenemos los términos cúbico, cuártico, etc. en el Hamiltoniano vibracional, estamos tratando con un cristal anarmónico. Los efectos de estos términos anarmónicos sobre la dispersión de los neutrones pueden describirse cualitativamente de la manera siguiente : cada una de las frecuencias de modo normal $\omega(\mathbf{q}j)$ sufre un corrimiento complejo $\Delta_{\mathbf{q}j} + i\Gamma_{\mathbf{q}j}$. La parte real es el corrimiento en frecuencia y la parte imaginaria es el inverso del tiempo de vida del fonón (ancho de línea). Como más adelante mostraremos, estas dos cantidades dependen de la temperatura.

Así, lo que en el caso del cristal armónico eran picos δ en frecuencias localizadas, para el caso anarmónico se convierten en picos ensanchados – estrictamente hablando, la forma de estos picos es una Lorentziana – y su ancho medio (FWHM) es $2\Gamma_{\mathbf{q}j}$ (ver figura 4.1). Un estudio de la dependencia en la temperatura del corrimiento en frecuencia y del ancho de línea puede encontrarse en [Haro, 1986b].

4.3 LA FORMULACIÓN DE FUNCIONES DE GREEN

Cuando un sistema físico, previamente en equilibrio, se sujeta a una influencia externa, su reacción a la influencia se conoce como *respuesta*. El objetivo de la Teoría de

Respuesta es predecir el comportamiento del sistema a una perturbación dada. La Teoría de Perturbaciones es adecuada bajo ciertas condiciones –perturbaciones pequeñas– pero puede no ser válida (o volverse lentamente convergente) en muchos casos físicos de interés. Entonces, necesitamos un formalismo que extienda el campo de validez de la Teoría de Perturbaciones y que se reduzca a ésta en el rango donde dicha teoría es aplicable.

Tal formalismo há sido desarrollado a partir de la aplicación de las técnicas de la Teoría Cuántica de Campos a problemas de muchos cuerpos y se conoce como Teoría de Funciones de Green. Con el objeto de entender como se introducen las funciones de Green en un tratamiento cuántico y cuál es su significado físico, estudiemos la descripción de un sistema por medio de la Mecánica Cuántica. La ecuación de movimiento es la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo [Dirac, 1954]

$$i\hbar\dot{\Psi}(\mathbf{r}, t) = H\Psi(\mathbf{r}, t) \quad (4.3.1)$$

la solución formal de esta ecuación es

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_j C_j(t)\psi_j(\mathbf{r})e^{-i\varepsilon_j t/\hbar} \quad (4.3.2)$$

donde $\psi_j(\mathbf{r})$ son las eigenfunciones de la ecuación independiente del tiempo y los coeficientes $C_j(t)$ son independientes del tiempo si el Hamiltoniano no lo contiene explícitamente. Usando Teoría de Perturbaciones, encontramos que estos coeficientes están dados por

$$C_j(t) = \int \psi_j^*(\mathbf{r}')\Psi(\mathbf{r}', t)e^{i\varepsilon_j t/\hbar} d\mathbf{r}' \quad (4.3.3)$$

sustituyendo (4.3.3) en (4.3.2), obtenemos

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \int g(\mathbf{r}'t'; \mathbf{r}, t)\Psi(\mathbf{r}', t')d\mathbf{r}' \quad (4.3.4)$$

donde

$$g(\mathbf{r}', t'; \mathbf{r}, t) = \sum_j \psi_j^*(\mathbf{r}')\psi_j(\mathbf{r})e^{-i\varepsilon_j(t-t')/\hbar}$$

El significado de esta expresión es claro: esta es la correlación entre una perturbación aplicada al sistema en el estado $\psi(\mathbf{r}')$ al tiempo t' que provoca que este pase al estado $\psi(\mathbf{r})$ al tiempo t (donde $t > t'$). Por esta razón, se dice que las funciones $g(\mathbf{r}', t'; \mathbf{r}, t)$ trazan la evolución en el tiempo del estado de un sistema y, por tanto, la respuesta a la perturbación. Así, a estas funciones se les conoce como *propagadores* o *funciones de Green*.

4.4 FUNCIONES DE GREEN PARA UN FONÓN Y ANCHO DE LÍNEA

Aunque pueden definirse funciones de Green como correlaciones entre operadores de aniquilación y creación, en la práctica se prefiere definir las en términos de los operadores de campo que aparecen en la transformación a coordenadas normales (ecs. (1.3.3) y (1.3.4)).

Una buena razón para proceder así es que el Hamiltoniano vibracional puede escribirse como una serie de potencias de las coordenadas normales (ecs. (1.3.5)). Siguiendo a Maradudin [Maradudin and Fein, 1962], definimos la función de Green de un fonón como:

$$G(\mathbf{q}j t; \mathbf{q}'j' t') = i \langle T \{ A_{\mathbf{q}j}(t) A_{\mathbf{q}'j'}^*(t') \} \rangle \quad (4.4.1)$$

donde T es el operador de ordenamiento en el tiempo dado por

$$T \{ A_{t_1} B_{t_2} C_{t_3} \} = C_{t_3} A_{t_1} B_{t_2} \quad \text{para } t_3 > t_1 > t_2$$

además, $\langle \rangle$ indica promedio termodinámico definido como

$$\langle A_t B_{t'} \rangle = \text{Tr} \{ A_t B_{t'} \rho \}$$

donde ρ es la matriz de densidad. Una propiedad muy conocida de estos promedios es que dependen únicamente de la diferencia de tiempos $t - t'$ y no de algún tiempo por separado. Por eso, haciendo $t - t' \rightarrow t$, obtenemos

$$G_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}(t) = i \langle T \{ A_{\mathbf{q}}(t) A_{\mathbf{q}'}^*(0) \} \rangle \quad (4.4.2)$$

en la ecuación anterior, suprimimos, por simplicidad, los subíndices j, j' ya que cada \mathbf{q} implica que existe j . Esta función posee propiedades periódicas, por lo que puede tener un desarrollo en serie de Fourier. Sustituyendo los operadores de campo por los operadores de aniquilación y creación, la función de Green se expresa como

$$G_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}(u) = \langle T \{ [a_{\mathbf{q}}^\dagger(u) + a_{\mathbf{q}}(u)] [a_{-\mathbf{q}'}(0) + a_{\mathbf{q}'}^\dagger(0)] \} \rangle \quad (4.4.3)$$

que es diferente de cero si $\mathbf{q} = \mathbf{q}'$. De estos cuatro promedios, solo dos son distintos de cero:

$$G_{\mathbf{q}\mathbf{q}}^0(u) = \langle T \{ [a_{-\mathbf{q}}^\dagger(u) a_{-\mathbf{q}}(0) + a_{\mathbf{q}}(u) a_{\mathbf{q}}^\dagger(0)] \} \rangle$$

Realizando el promedio termodinámico y usando la periodicidad de las funciones de Green

$$G_{\mathbf{q}}(\omega_p) = \frac{1}{\beta} \int_0^\beta G_{\mathbf{q}}(u) e^{-i\hbar\omega_p u} du$$

se obtiene

$$G_{\mathbf{q}}^0(\omega_p) = \frac{2\omega_{\mathbf{q}}}{\beta\hbar(\omega_{\mathbf{q}}^2 + \omega_p^2)} \quad (4.4.4)$$

que es el propagador de fonones armónico [Maradudin and Fein, 1962]. Es importante notar que esta es una cantidad puramente real. Este propagador puede utilizarse como una base para una expansión como la que estudiamos en el cap. 1. Esto significa que, para cada orden de interacción, calcularemos el propagador de fonones correspondiente. En la fig. 4.2, representamos los casos en los cuales $n = 0, 1, 2$. El caso $n = 0$ representa

al cristal armónico. El segundo diagrama representa la contribución de primer orden, en tanto que el tercero presenta la contribución de segundo orden (que es la que nos interesa calcular). De acuerdo con Maradudin, la contribución de segundo orden a la energía propia (*self energy*) es

$$S_p^{(2)}(qj j') = 18\beta^2 \sum_{\mathbf{q}_1 j_1} \sum_{\mathbf{q}_2 j_2} \sum_{p_1 p_2} |V(\mathbf{q}j | \mathbf{q}_1 j_1 | \mathbf{q}_2 j_2)|^2 G_{\mathbf{q}_1 j_1}^0(\omega_{p_1}) \times G_{\mathbf{q}_2 j_2}^0(\omega_{p_2}) \delta(p - p_1 - p_2) \quad (4.4.5)$$

que, como habíamos anticipado, está expresada en función de los propagadores armónicos (4.4.4). Sustituyendo los propagadores, obtenemos

$$\sum_{p_1 p_2} G_{\mathbf{q}_1 j_1}^0(\omega_{p_1}) G_{\mathbf{q}_2 j_2}^0(\omega_{p_2}) \delta(p - p_1 - p_2) = \frac{4\omega_1 \omega_2}{\beta^2 \hbar^2} \sum_{p_1 = -\infty}^{\infty} \frac{1}{(\omega_{p_1}^2 + \omega_1^2)[(\omega_p - \omega_{p_1})^2 + \omega^2]}$$

Después de un poco de álgebra, se obtiene

$$\sum_{p_1 p_2} G_{\mathbf{q}_1 j_1}^0(\omega_{p_1}) G_{\mathbf{q}_2 j_2}^0(\omega_{p_2}) \delta(p - p_1 - p_2) = \frac{1}{\beta \hbar} \left[\frac{n_1 + n_2 + 1}{D_1} + \frac{n_1 - n_2}{D_2} + \frac{n_1 + n_2 + 1}{D_3} + \frac{n_2 - n_1}{D_4} \right] \quad (4.4.6)$$

en donde

$$\begin{aligned} D_1 &= \omega_1 + \omega_2 - i\omega_p \\ D_2 &= \omega_1 - \omega_2 + i\omega_p \\ D_3 &= \omega_1 + \omega_2 + i\omega_p \\ D_4 &= \omega_1 - \omega_2 - i\omega_p \end{aligned} \quad (4.4.7)$$

y n_i se define como

$$n_i = \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega_i} - 1}$$

siendo

$$\beta = \frac{1}{kT}$$

aquí k es la constante de Boltzmann y T es la temperatura absoluta.

Ahora, transformemos a una función de variable continua, tal que $f(\omega) = f(i\omega_p)$ cuando $\omega = i\omega_p$ (esto es, realizando la continuación analítica $i\omega_p \rightarrow \omega + i\varepsilon$, donde $\varepsilon \rightarrow +0$). Con este fin, tomamos la representación:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \frac{1}{x \pm i\varepsilon} = \frac{1}{(x)_P} \mp i\pi \delta(x) \quad (4.4.8)$$

donde P indica parte principal de la función. Así, sustituyendo en la energía propia, obtenemos (para la parte real)

$$\begin{aligned} \Delta_{\mathbf{q}j} = & 18\beta\hbar^2 |V(\mathbf{q}j|\mathbf{q}_1j_1|\mathbf{q}_2j_2)|^2 \left[\frac{n_1 + n_2 + 1}{(\omega_1 + \omega_2 - \omega)} + \frac{n_1 - n_2}{(\omega_1 - \omega_2 + \omega)} \right. \\ & \left. + \frac{n_1 + n_2 + 1}{(\omega_1 + \omega_2 + \omega)} + \frac{n_2 - n_1}{(\omega_1 - \omega_2 - \omega)} \right]_P \Delta(\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 - \mathbf{q}) \end{aligned} \quad (4.4.9)$$

Del mismo modo, tomando la parte imaginaria de (4.4.8) y usando (4.4.6) y (4.4.9), encontramos que el ancho de línea está dado por

$$\begin{aligned} \Gamma_{\mathbf{q}j} = & \frac{18\pi}{\hbar^2} \sum_{\mathbf{q}_1j_1} \sum_{\mathbf{q}_2j_2} |V(\mathbf{q}j|\mathbf{q}_1j_1|\mathbf{q}_2j_2)|^2 \\ & \left[(n_1 + n_2 + 1)[\delta(\omega - \omega_1 - \omega_2) - \delta(\omega + \omega_1 + \omega_2)] \right. \\ & \left. + (n_1 - n_2)[\delta(\omega + \omega_1 - \omega_2) - \delta(\omega - \omega_1 + \omega_2)] \right] \end{aligned} \quad (4.4.10)$$

Esta cantidad es muy importante, ya que su magnitud relativa a la parte Hermitiana (el corrimiento Δ) determina la validez de un modelo pseudoarmónico. Como es fácil notar, la contribución cúbica de Γ está determinada por la doble densidad de estados. Si Γ es pequeña comparada con la Δ , el modelo de una colección de fonones independientes con frecuencias renormalizadas y con tiempos de vida propios, es una buena representación del cristal.

Además, como habíamos anticipado, Δ y Γ dependen de la temperatura a través de la densidad de fonones n_i . Un estudio de esta dependencia puede encontrarse en [Menéndez and Cardona, 1984] y en [Haro, 1986]. Si uno sustituye los módulos de los CA encontrados en el capítulo 2, se obtiene $\Gamma_{\mathbf{q}j}$ en direcciones de alta simetría.

En el capítulo 5, calcularemos numéricamente el ancho de línea del silicio y germanio evaluando la ec. (4.4.10). Los CA que aparecen en dicha ecuación no necesariamente pertenecen a direcciones de alta simetría, por lo que usaremos el modelo de Wanser (capítulo 3) de cuatro y diez parámetros para calcularlos de manera numérica.

CAPÍTULO 5

CÁLCULOS NUMÉRICOS

5.1 INTRODUCCIÓN

El objetivo de este capítulo es presentar los resultados numéricos logrados aplicando el modelo de Wanser de diez y cuatro parámetros al cálculo de las eigenfrecuencias y el ancho de línea del silicio y germanio. Este modelo fué estudiado en el capítulo 3. El conocimiento de las eigenfrecuencias nos permite construir las curvas de dispersión y compararlas con los datos experimentales [Nilsson and Nelin, 1973]. Como vimos en el cap. anterior, el ancho de línea depende de la temperatura; por esta razón, lo calculamos para varias temperaturas y hacemos una comparación con estudios experimentales realizados.

5.2 CURVAS DE DISPERSIÓN

Como hemos mencionado anteriormente (Cap. 1), la relación

$$\omega = \omega(\mathbf{q}, j)$$

nos permite construir las curvas de dispersión a lo largo de direcciones de alta simetría. El procedimiento es como sigue: se construye la matriz dinámica incluyendo las interacciones centrales de vecinos cercanos, interacciones angulares y de dipolos no locales. Una vez obtenida la matriz dinámica, se diagonaliza para encontrar sus eigenvalores (que son las frecuencias al cuadrado). Este procedimiento se repite para los 770 puntos del sector irreducible de la primera zona de Brillouin.

En las siguientes gráficas, se presentan las curvas de dispersión ajustadas usando los modelos de diez y cuatro parámetros de Wanser para el silicio. Para el germanio, en cambio, las curvas de dispersión se ajustan utilizando los modelos de cuatro y tres parámetros (sin dipolos). Como hemos mencionado con anterioridad (cap. 3), si no incluimos las interacciones dipolares, no obtenemos el abatimiento de las ramas transversal acústicas. Esto aparece de manera evidente en las gráficas de germanio tres parámetros (dirección [100]) así como en la de silicio tres parámetros (direcciones [100] y [111]).

El ajuste logrado usando el modelo de diez parámetros es muy bueno, especialmente en las ramas acústicas. El modelo de cuatro parámetros ajusta muy bien las ramas acústicas, y no muestra gran diferencia con relación a los resultados obtenidos usando el modelo anterior. Los datos experimentales fueron tomados del trabajo de Nilsson et al [Nilsson and Nelin, 1973].

En cuanto a las ramas ópticas, el ajuste logrado entre los datos experimentales y los resultados teóricos no es tan bueno. Esto es evidente en la dirección [111]. Sin embargo, como vimos en el capítulo 2, los principales canales de decaimiento del fonón óptico son combinaciones de fonones pertenecientes a las ramas **LA** y **TA**, por lo que, al parecer, un buen ajuste de las ramas ópticas de las curvas de dispersión permite calcular con muy buena aproximación otras cantidades tales como el ancho de línea y el corrimiento en frecuencia.

Cabe señalar que, en la literatura del tema, existen pocos resultados teóricos del ancho de línea para materiales con estructura de diamante. Entonces, el objetivo de la siguiente sección será calcular el ancho de línea como función de la temperatura y compararlo con los datos experimentales.

5.3 ANCHO DE LÍNEA EN FUNCIÓN DE LA TEMPERATURA

Para obtener el ancho de línea, calculamos numéricamente la ecuación () del cap. 4. Esto implica que los **CA** son evaluados de manera numérica para los 770 puntos de la Primera zona de Brillouin en direcciones no necesariamente de alta simetría. En seguida, presentamos los resultados obtenidos.

SILICIO

$T(K)$	FWHM(4)	FWHM(10)
10	1.159	1.162
20	1.160	1.163
30	1.163	1.167
50	1.182	1.188
100	1.328	1.332
300	2.499	2.504
500	3.912	3.918
700	5.376	5.383
900	6.859	6.867
1100	8.350	8.359
1300	9.849	9.856
1500	11.350	11.356

En la tabla anterior, FWHM(4) indica ancho calculado con el modelo de cuatro parámetros; en tanto, FWHM(10) es el ancho de línea obtenido mediante el modelo de diez parámetros. En la gráfica 5.1 presentamos estos resultados y los comparamos con los datos experimentales. Es importante notar que el valor del ancho obtenido por cuatro y diez parámetros es muy parecido. Analizando dicha gráfica, se observa una buena coincidencia en el rango de temperaturas 0–570 K. A temperaturas superiores a 600 K, el ancho de línea experimental crece más rápidamente de tal modo que el modelo de Wanser no describe adecuadamente este comportamiento. El valor experimental del ancho a 10 K es 1.24 cm^{-1} y el valor teórico es 1.16 cm^{-1} .

GERMANIO

$T(K)$	FWHM(3)	FWHM(4)
10	0.45	0.529
20	0.452	0.53
30	0.455	0.537
50	0.474	0.569
100	0.492	0.736
300	1.372	1.74
500	2.228	2.831
700	3.097	3.937
900	3.97	5.047
1100	4.845	6.16
1300	5.72	7.274
1500	6.597	8.39

En esta tabla, mostramos los resultados obtenidos aplicando el modelo de Wanser de tres y cuatro parámetros. En la gráfica 5.2, presentamos los puntos teóricos y comparamos con los datos experimentales; el comportamiento del modelo es idéntico al caso del silicio en el rango 0–500 K, separándose de los puntos experimentales a temperaturas superiores a 500 K. El valor experimental del ancho de línea a 10 K es 0.75cm^{-1} . El ancho teórico es 0.53cm^{-1} .

5.4 COMPARACIÓN CON OTROS MODELOS TEÓRICOS

Anteriormente, Cowley y Klemens, entre otros, hicieron un estudio del ancho de línea como función de la temperatura. A continuación, haremos una breve revisión de estos y otros trabajos.

5.4.1 MODELO DE KLEMENS

Klemens realiza un estudio de la anarmonicidad en silicio considerando un modelo de interacciones centrales. En su trabajo, Klemens supone que el fonón Raman decae en dos fonones longitudinal acústicos. Con estos elementos, Klemens obtiene un ancho de línea de 0.048cm^{-1} , siendo el valor experimental igual a 1.24cm^{-1} . Para el germanio, el ancho teórico es de 0.029cm^{-1} y el valor experimental es de 0.75cm^{-1} . Todos los anchos anteriores son calculados a $T = 10\text{K}$.

Como es evidente, este modelo da un ancho treinta veces menor en el caso del silicio y casi veinticinco veces menor para el germanio. Como hemos mostrado explícitamente los CA son nulos a lo largo de la dirección [100] para dos fonones LA-LA. Por tanto, no es correcto el cálculo de Klemens.

5.4.2 MODELO DE COWLEY

Enfocando el problema de manera más realista, Cowley calcula el ancho de línea del silicio. El modelo de Cowley consistía de dos partes: la parte armónica del modelo incluía un shell model con parámetros determinados mediante el ajuste de las curvas de dispersión de fonones. Para la parte anarmónica, consideraba un término anarmónico cúbico de primeros vecinos con dos parámetros a determinar por medio del ajuste de datos de expansión térmica.

Sorprendentemente, los resultados obtenidos por Cowley (para el ancho) son mayores que el valor experimental y el obtenido por Klemens, cuyo enfoque es mas simplista. Los anchos teóricos obtenidos por Cowley son, en cm^{-1} y a $T = 10K$, iguales a 11.34 (silicio) y 5.34 (germanio). Contrastando con los datos experimentales, el ancho teórico de Cowley es alrededor de diez veces mayor (silicio) y casi ocho veces mayor en el caso del germanio. Según Menéndez y Cardona, las fallas del modelo de Cowley se deben a la pobre descripción de las curvas de dispersión por el modelo de capas.

5.5 RESUMEN

De acuerdo con la comparación realizada, la mejor concordancia entre valor experimental y resultado teórico del ancho de línea está dada por el modelo de Wanser. Esta concordancia se presenta como un criterio para discriminar entre los distintos modelos propuestos para describir las propiedades anarmónicas de los sólidos con estructura de diamante. Un criterio adicional es la calidad del ajuste de las curvas de dispersión de fonones que, como hemos mostrado en la sección 5.2, para el modelo de Wanser es especialmente bueno en las ramas acústicas y adecuado en las ramas ópticas.

CONCLUSIONES Y PERSPECTIVAS

En este punto, es importante discutir los resultados obtenidos en los capítulos anteriores. Hay que recordar cuales eran los objetivos principales de esta tesis:

a) Calcular analíticamente los **CA** y mostrar la existencia de canales de decaimiento prohibidos, así como las relaciones entre las diferentes polarizaciones del fonón Raman.

b) Ajustar las curvas de dispersión a lo largo de direcciones de alta simetría para el silicio y germanio.

c) Calcular numéricamente el ancho de línea del silicio y germanio y compararlo con los datos experimentales.

Así, analizaremos cada uno de estos objetivos y presentaremos algunos comentarios y conclusiones.

CÁLCULO ANALÍTICO

En un estudio anterior, Klemens propuso como principal canal de decaimiento del fonón óptico la descomposición de éste en dos fonones **LA**. En el cap. 2, hemos mostrado que, a lo largo de la dirección [100], el canal de decaimiento

$$\omega_{RA} = \omega_{LA} + \omega_{LA}$$

está prohibido. Por tanto, en la dirección [100], la hipótesis de Klemens no es correcta.

Toda esta regularidad mostrada en los coeficientes anarmónicos cúbicos de orden impar es un reflejo de las propiedades de simetría del cristal. Además, anteriormente a este estudio, no se habían obtenido los **CA** para terceros y quintos vecinos.

En la aproximación de Peierls, los **CA** están dados por

$$V(\mathbf{q}j|\mathbf{q}'j'|\mathbf{q}''j'') = C(\omega_{\mathbf{q}j}\omega_{\mathbf{q}'j'}\omega_{\mathbf{q}''j''})^{1/2}$$

claramente, esta expresión suprime toda dependencia explícita en el vector \mathbf{q} . Si la comparamos con la ec. que nos permite calcular los coeficientes (cap. 2), no se encuentra similitud en la forma funcional del producto de frecuencias (en nuestra expresión dicho producto esta elevado a la potencia $-1/2$).

CURVAS DE DISPERSIÓN

El modelo de Wanser y Wallis de diez parámetros ajusta muy bien las ramas acústicas de las curvas de dispersión de silicio y germanio. La descripción de estas curvas por parte del modelo de cuatro parámetros es buena, especialmente en las ramas acústicas. Haciendo un análisis de los puntos que satisfacen la relación

$$\omega_{RA} = \omega_{\mathbf{q}j} + \omega_{\mathbf{q}'j'}$$

se encuentra que la gran mayoría de ellos (alrededor del noventa por ciento de los puntos) pertenecen a las ramas acústicas (longitudinales y transversales). Esto nos muestra por qué es tan importante que nuestro modelo describa adecuadamente el comportamiento de

las ramas acústicas. La presencia de interacciones de largo alcance (dipolos no locales) produce el abatimiento característico de las ramas transversal acústicas en las fronteras de zona.

ANCHO DE LÍNEA

El ancho de línea calculado con este modelo a 10 K se ajusta muy bien para el silicio (1.16 vs 1.24 cm^{-1} , 10 parámetros); con el modelo de cuatro par., calculamos el valor correspondiente al germanio, resultando 0.53 cm^{-1} contra 0.75 cm^{-1} del valor experimental. Estos resultados son, por mucho, mejores que los obtenidos por Cowley y Klemens (cap. 5).

En cuanto a la dependencia con la temperatura, el ancho calculado se ajusta al ancho experimental en el rango de temperaturas de $0\text{--}500\text{ K}$. A temperaturas superiores, los procesos de orden superior (cuárticos) deben tomarse en cuenta para explicar el comportamiento del ancho de línea.

PERSPECTIVAS

Este mismo análisis de las curvas de dispersión y del ancho de línea puede realizarse en otros materiales que poseen la estructura de diamante, como son el diamante y el $\alpha\text{-Sn}$. Los resultados que se obtenga de dicho trabajo servirán para mostrar si este modelo es adecuado para describir a todos los materiales con esta estructura.

APÉNDICE A

En este apéndice, mostraremos, a grandes rasgos, como se diagonaliza a la parte armónica del Hamiltoniano vibracional del cristal (ec. (1.3.1)) y como se obtienen las ecuaciones (1.3.5) y (1.3.6) que nos expresan a los coeficientes anarmónicos cúbicos y cuárticos como funciones de los vectores de polarización y de las constantes de fuerza. Con este fin, comencemos con el Hamiltoniano vibracional

$$H = H_0 + H_A \quad (\text{A.1})$$

en donde, H_0 denota a la parte armónica del Hamiltoniano,

$$H_0 = \sum_{l\kappa\alpha} \frac{P_\alpha^2(l\kappa)}{2M} + \frac{1}{2} \sum_{l\kappa\alpha} \sum_{l'\kappa'\beta} \Phi_{\alpha\beta}(l\kappa|l'\kappa') u_\alpha(l\kappa) u_\beta(l'\kappa') \quad (\text{A.2})$$

y H_A es la parte anarmónica del Hamiltoniano

$$\begin{aligned} H_A = & \frac{1}{6} \sum_{l\kappa\alpha} \sum_{l'\kappa'\beta} \sum_{l''\kappa''\gamma} \Phi_{\alpha\beta\gamma}(l\kappa|l'\kappa'|l''\kappa'') u_\alpha(l\kappa) u_\beta(l'\kappa') u_\gamma(l''\kappa'') \\ & + \frac{1}{24} \sum_{l\kappa\alpha} \cdots \sum_{l'''\kappa'''\delta} \Phi_{\alpha\beta\gamma\delta}(l\kappa|l'\kappa'|l''\kappa''|l'''\kappa''') u_\alpha(l\kappa) u_\beta(l'\kappa') u_\gamma(l''\kappa'') u_\delta(l'''\kappa''') \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

PARTE ARMÓNICA

Introduciendo la transformación a coordenadas normales [Maradudin and Horton, 1973]

$$\mathbf{u}(l\kappa) = \left(\frac{\hbar}{2NM} \right)^{1/2} \sum_{\mathbf{q}j} \frac{\mathbf{e}(\kappa|\mathbf{q}j)}{(\omega_{\mathbf{q}j})^{1/2}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}(l)} A_{\mathbf{q}j} \quad (\text{A.4 a})$$

$$\mathbf{P}(l\kappa) = -i \left(\frac{\hbar M}{2N} \right)^{1/2} \sum_{\mathbf{q}j} (\omega_{\mathbf{q}j})^{1/2} \mathbf{e}(\kappa|\mathbf{q}j) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}(l)} B_{\mathbf{q}j} \quad (\text{A.4 b})$$

se obtiene, para la parte cinética

$$\sum_{l\kappa\alpha} \frac{p_\alpha^2(l\kappa)}{2M_\kappa} = \frac{1}{4N} \sum_{\mathbf{q}j} \hbar\omega_{\mathbf{q}j} B_{\mathbf{q}j} B_{\mathbf{q}j}^\dagger \sum_{l\kappa\alpha} e_\alpha(\kappa|\mathbf{q}j) e_\alpha^*(\kappa|\mathbf{q}j)$$

pero, por la relación de ortonormalidad

$$\sum_{\kappa\alpha} e_\alpha^*(\kappa|\mathbf{q}j) e_\alpha(\kappa|\mathbf{q}j) = 1$$

por tanto

$$\sum_{l\kappa\alpha} \frac{p_\alpha^2(l\kappa)}{2M_\kappa} = \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{q}j} \hbar\omega_{\mathbf{q}j} B_{\mathbf{q}j}^\dagger B_{\mathbf{q}j} \quad (\text{A.5 a})$$

de manera similar

$$\frac{1}{2} \sum_{l\kappa\alpha} \sum_{l'\kappa'\beta} \Phi_{\alpha\beta}(l\kappa|l'\kappa') u_\alpha(l\kappa) u_\beta(l'\kappa') = \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{q}j} \hbar\omega_{\mathbf{q}j} A_{\mathbf{q}j}^\dagger A_{\mathbf{q}j} \quad (\text{A.5 b})$$

así, el Hamiltoniano armónico es

$$\begin{aligned} H_0 &= \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{q}j} \hbar\omega_{\mathbf{q}j} [B_{\mathbf{q}j}^\dagger B_{\mathbf{q}j} + A_{\mathbf{q}j}^\dagger A_{\mathbf{q}j}] \\ &= \sum_{\mathbf{q}j} \hbar\omega_{\mathbf{q}j} [b_{\mathbf{q}j}^\dagger b_{\mathbf{q}j} + 1/2] \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

PARTE ANARMÓNICA

Por sustitución directa de (A.4), la parte cúbica del Hamiltoniano anarmónico (ec. (A.3)) puede escribirse como

$$\begin{aligned} H_A^{(3)} &= \frac{1}{6} \left(\frac{\hbar}{2MN} \right)^{3/2} \sum_{\mathbf{q}j, \mathbf{q}'j', \mathbf{q}''j''} \sum_{l\kappa\alpha} \sum_{l'\kappa'\beta} \sum_{l''\kappa''\gamma} \Phi_{\alpha\beta\gamma}(l\kappa|l'\kappa'|l''\kappa'') \\ &\quad \times (\omega_{\mathbf{q}j} \omega_{\mathbf{q}'j'} \omega_{\mathbf{q}''j''})^{-1/2} e_\alpha(\kappa|\mathbf{q}j) e_\beta(\kappa'|\mathbf{q}'j') e_\gamma(\kappa''|\mathbf{q}''j'') \\ &\quad \times e^{i[\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}(l) + \mathbf{q}'\cdot\mathbf{R}(l') + \mathbf{q}''\cdot\mathbf{R}(l'')]} A_{\mathbf{q}j} A_{\mathbf{q}'j'} A_{\mathbf{q}''j''} \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

pero, por la invariancia ante la traslación, se cumple

$$\Phi_{\alpha\beta\gamma\dots}(l\kappa|l'\kappa'|\dots) = \Phi_{\alpha\beta\gamma\dots}(0, \kappa|l-l', \kappa'|\dots) \quad (\text{A.8})$$

Así, los coeficientes anarmónicos serán diferentes de cero solo si la suma de los vectores de onda involucrados en el proceso es un vector de traslación de la red. Por tanto, los coeficientes anarmónicos cúbicos pueden escribirse como

$$\begin{aligned} V(\mathbf{q}j|\mathbf{q}'j'|\mathbf{q}''j'') &= \frac{N}{6} \left(\frac{\hbar}{2NM} \right)^{3/2} \sum_{l\kappa\alpha} \sum_{l'\kappa'\beta} \sum_{l''\kappa''\gamma} \Phi_{\alpha\beta\gamma}(0\kappa|l'\kappa'|l''\kappa'') \\ &\quad \times (\omega_{\mathbf{q}j} \omega_{\mathbf{q}'j'} \omega_{\mathbf{q}''j''})^{-1/2} e_\alpha(\kappa|\mathbf{q}j) e_\beta(\kappa'|\mathbf{q}'j') e_\gamma(\kappa''|\mathbf{q}''j'') \\ &\quad \times e^{i[\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}(l) + \mathbf{q}'\cdot\mathbf{R}(l') + \mathbf{q}''\cdot\mathbf{R}(l'')]} \Delta(\mathbf{q} + \mathbf{q}' + \mathbf{q}'') \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

donde $\Delta(\mathbf{q})$ es la delta de Born definida por

$$\Delta(\mathbf{q}) = 1$$

si \mathbf{q} es un vector de traslación de la red. En cualquier otro caso, $\Delta(\mathbf{q}) = 0$. Del mismo modo, se obtienen los coeficientes anarmónicos cuárticos (ec. (1.3.6)).

APÉNDICE B

En la sección [1.4], obtuvimos las ecuaciones de movimiento de manera clásica y mencionamos que estas ecuaciones podían obtenerse usando el formalismo cuántico. Para mostrar lo anterior, comencemos con el Hamiltoniano

$$\begin{aligned}
 H &= \sum_{l\kappa\alpha} \frac{P_\alpha^2(l\kappa)}{2M} + \frac{1}{2} \sum_{l\kappa\alpha} \sum_{l'\kappa'\beta} \Phi_{\alpha\beta}(l\kappa|l'\kappa') u_\alpha(l\kappa) u_\beta(l'\kappa') \\
 &+ \frac{1}{6} \sum_{l\kappa\alpha} \sum_{l'\kappa'\beta} \sum_{l''\kappa''\gamma} \Phi_{\alpha\beta\gamma}(l\kappa|l'\kappa'|l''\kappa'') u_\alpha(l\kappa) u_\beta(l'\kappa') u_\gamma(l''\kappa'') \\
 &+ \frac{1}{24} \sum_{l\kappa\alpha} \cdots \sum_{l'''\kappa'''\delta} \Phi_{\alpha\beta\gamma\delta}(l\kappa|l'\kappa'|l''\kappa''|l'''\kappa''') u_\alpha(l\kappa) u_\beta(l'\kappa') \\
 &\times u_\gamma(l''\kappa'') u_\delta(l'''\kappa''')
 \end{aligned} \tag{B.1}$$

donde, $\hat{p}_\alpha(l\kappa)$ y $\hat{u}_\alpha(l\kappa)$ son los operadores de momento y posición, respectivamente. Estos operadores obedecen la relación de conmutación [Maradudin et al, 1972]

$$[\hat{u}_\alpha(l\kappa), \hat{p}_\beta(l'\kappa')] = i\hbar \delta_{ll'} \delta_{\kappa\kappa'} \delta_{\alpha\beta} \tag{B.2}$$

En la representación de Heisenberg, la ecuación para el operador de posición es [Dirac, 1954]

$$\dot{u}_\alpha(l\kappa) = \frac{i}{\hbar} [H, u_\alpha(l\kappa)] \tag{B.3}$$

y, utilizando las identidades entre conmutadores

$$\begin{aligned}
 [\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] &= \hat{A} [\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}] \hat{B} \\
 [\hat{A} + \hat{B}, \hat{C}] &= [\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{B}, \hat{C}]
 \end{aligned}$$

obtenemos

$$\dot{u}_\alpha(l\kappa) = \frac{p_\alpha(l\kappa)}{M} \tag{B.4}$$

También, la ecuación de movimiento para el operador de momento es

$$\dot{p}_\alpha(l\kappa) = \frac{i}{\hbar} [H, p_\alpha(l\kappa)] \tag{B.5}$$

sustituyendo el Hamiltoniano (ecuación (B.1)), se obtiene

$$\dot{p}_\alpha(l\kappa) = - \sum_{l'\kappa'\beta} \Phi_{\alpha\beta}(l\kappa|l'\kappa') u_\beta(l'\kappa') \tag{B.6}$$

derivando (B.4) con respecto al tiempo

$$M\ddot{u}_\alpha(l\kappa) = \dot{p}_\alpha(l\kappa) \tag{B.7}$$

y, comparando (B.6) con (B.7), encontramos

$$M\ddot{u}_\alpha(l\kappa) = - \sum_{l'\kappa'\beta} \Phi_{\alpha\beta}(l\kappa|l'\kappa') u_\beta(l'\kappa') \tag{B.8}$$

que son las ecuaciones de movimiento (1.4.1).

APÉNDICE C

En este apéndice, obtenemos la expresión que nos permite calcular los coeficientes anarmónicos cúbicos a lo largo de direcciones de alta simetría, considerando interacciones de campo central. La contribución cúbica a la energía potencial está dada por

$$\Phi_{3c} = \frac{1}{12} \sum_{l\kappa\alpha} \sum_{l'\kappa'\beta} \Phi_{\alpha\beta\gamma}(l\kappa|l'\kappa') u_\alpha(l\kappa|l'\kappa') u_\beta(l\kappa|l'\kappa') u_\gamma(l\kappa|l'\kappa') \quad (\text{C.1})$$

por otro lado, la transformación a coordenadas normales es

$$u_\alpha(l\kappa) = \left(\frac{\hbar}{2NM} \right)^{1/2} \sum_{\mathbf{q}j} \frac{e_\alpha(\kappa|\mathbf{q}j)}{(\omega_{\mathbf{q}j})^{1/2}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}(l)} A_{\mathbf{q}j} \quad (\text{C.2})$$

por definición

$$u_\alpha(l\kappa|l'\kappa') = u_\alpha(l\kappa) - u_\alpha(l'\kappa') \quad (\text{C.3})$$

sustituyendo la transformación a coordenadas normales (ec. (C.2)) en la ecuación anterior, obtenemos

$$\begin{aligned} u_\alpha(l\kappa|l'\kappa') &= \left(\frac{\hbar}{2NM} \right)^{1/2} \sum_{\mathbf{q}j} [e_\alpha(\kappa|\mathbf{q}j) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}(l)} - e_\alpha(\kappa'|\mathbf{q}j) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}(l')}] \\ &\quad \times (\omega_{\mathbf{q}j})^{-1/2} A_{\mathbf{q}j} \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$

sustituyendo lo anterior en (C.1), y usando la invariancia ante la traslación, la contribución cúbica a la energía potencial está dada por

$$H_A^{(3)} = \sum_{\mathbf{q}j, \mathbf{q}'j', \mathbf{q}''j''} V(\mathbf{q}j|\mathbf{q}'j'|\mathbf{q}''j'') A_{\mathbf{q}j} A_{\mathbf{q}'j'} A_{\mathbf{q}''j''} \quad (\text{C.5})$$

en donde

$$\begin{aligned} V(\mathbf{q}j|\mathbf{q}'j'|\mathbf{q}''j'') &= \frac{N}{12} \left(\frac{\hbar}{2NM} \right)^{3/2} \sum_{l\kappa\alpha} \sum_{l'\kappa'\beta} \Phi_{\alpha\beta\gamma}(0\kappa|l'\kappa') (\omega_{\mathbf{q}j} \omega_{\mathbf{q}'j'} \omega_{\mathbf{q}''j''})^{-1/2} \\ &\quad \times \Delta(\mathbf{q} + \mathbf{q}' + \mathbf{q}'') [e_\alpha(\kappa|\mathbf{q}j) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}(l)} - e_\alpha(\kappa'|\mathbf{q}j) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}(l')}] \\ &\quad \times [e_\beta(\kappa|\mathbf{q}'j') e^{i\mathbf{q}'\cdot\mathbf{R}(l)} - e_\beta(\kappa'|\mathbf{q}'j') e^{i\mathbf{q}'\cdot\mathbf{R}(l')}] \\ &\quad \times [e_\gamma(\kappa|\mathbf{q}''j'') e^{i\mathbf{q}''\cdot\mathbf{R}(l)} - e_\gamma(\kappa'|\mathbf{q}''j'') e^{i\mathbf{q}''\cdot\mathbf{R}(l')}] \end{aligned}$$

que es la ecuación (1.5.11) presentada en el capítulo 1.

APÉNDICE D

En este apéndice, presentamos las tablas necesarias para realizar los cálculos señalados en el capítulo 2. En las páginas siguientes aparecen las tablas de constantes de fuerza para primeros, terceros y quintos vecinos.

PRIMEROS VECINOS

	Φ_{111}	Φ_{222}	Φ_{333}	Φ_{112}	Φ_{113}	Φ_{221}	Φ_{123}
$i = 1$	$-\alpha_1$	$-\alpha_1$	$-\alpha_1$	$-\alpha_2$	$-\alpha_2$	$-\alpha_2$	α_3
$i = 2$	α_1	α_1	$-\alpha_1$	α_2	$-\alpha_2$	α_2	α_3
$i = 3$	$-\alpha_1$	α_1	α_1	α_2	α_2	$-\alpha_2$	α_3
$i = 4$	α_1	$-\alpha_1$	α_1	$-\alpha_2$	α_2	α_2	α_3

donde

$$\alpha_1 = c_1 A_1 + 3d_1 B_1$$

$$\alpha_2 = c_1 A_1 + d_1 B_1$$

$$\alpha_3 = -c_1 A_1$$

además, se cumplen las relaciones entre constantes

$$\Phi_{112}^i = \Phi_{332}^i$$

$$\Phi_{113}^i = \Phi_{223}^i$$

$$\Phi_{221}^i = \Phi_{331}^i$$

para $i = 1, \dots, 4$.

TERCEROS VECINOS

	Φ_{111}	Φ_{222}	Φ_{333}	Φ_{112}	Φ_{113}	Φ_{221}	Φ_{223}	Φ_{331}	Φ_{332}
$i = 1$	$-\beta_1$	β_1	$-\beta_2$	β_3	$-3\beta_3$	$-\beta_3$	$-3\beta_3$	$-\beta_4$	β_4
$i = 2$	$-\beta_1$	β_2	$-\beta_1$	$3\beta_3$	$-\beta_3$	$-\beta_4$	$-\beta_4$	$-\beta_3$	$3\beta_3$
$i = 3$	$-\beta_2$	β_1	$-\beta_1$	β_4	$-\beta_4$	$-3\beta_3$	$-\beta_3$	$-3\beta_3$	β_3
$i = 4$	β_1	$-\beta_1$	$-\beta_2$	$-\beta_3$	$-3\beta_3$	β_3	$-3\beta_3$	β_4	$-\beta_4$
$i = 5$	β_1	$-\beta_2$	$-\beta_1$	$-3\beta_3$	$-\beta_3$	β_4	$-\beta_4$	β_3	$-3\beta_3$
$i = 6$	β_2	$-\beta_1$	$-\beta_1$	$-\beta_4$	$-\beta_4$	$3\beta_3$	$-\beta_3$	$3\beta_3$	$-\beta_3$
$i = 7$	$-\beta_1$	$-\beta_1$	β_2	$-\beta_3$	$3\beta_3$	$-\beta_3$	$3\beta_3$	$-\beta_4$	$-\beta_4$
$i = 8$	$-\beta_2$	$-\beta_1$	β_1	$-\beta_4$	β_4	$-3\beta_3$	β_3	$-3\beta_3$	$-\beta_3$
$i = 9$	$-\beta_1$	$-\beta_2$	β_1	$-3\beta_3$	β_3	$-\beta_4$	β_4	$-\beta_3$	$-3\beta_3$
$i = 10$	β_1	β_1	β_2	β_3	$3\beta_3$	β_3	$3\beta_3$	β_4	β_4
$i = 11$	β_2	β_1	β_1	β_4	β_4	$3\beta_3$	β_3	$3\beta_3$	β_3
$i = 12$	β_1	β_2	β_1	$3\beta_3$	β_3	β_4	β_4	β_3	$3\beta_3$

además, $\Phi_{123}^i = \beta_5$ para $i = 1, \dots, 12$. En la tabla anterior, definimos

$$\begin{aligned}\beta_1 &= c_3 A_3 + 3d_3 B_3 \\ \beta_2 &= 27c_3 A_3 + 9d_3 B_3 \\ \beta_3 &= c_3 A_3 + d_3 B_3 \\ \beta_4 &= 9c_3 A_3 + d_3 B_3 \\ \beta_5 &= 3c_3 A_3\end{aligned}$$

QUINTOS VECINOS

	Φ_{111}	Φ_{222}	Φ_{333}	Φ_{112}	Φ_{113}	Φ_{221}	Φ_{223}	Φ_{331}	Φ_{332}
$i = 1$	$-\gamma_1$	$-\gamma_1$	$-\gamma_2$	$-\gamma_3$	$-\gamma_5$	$-\gamma_3$	$-\gamma_5$	$-\gamma_4$	$-\gamma_4$
$i = 2$	$-\gamma_2$	$-\gamma_1$	$-\gamma_1$	$-\gamma_4$	$-\gamma_4$	$-\gamma_5$	$-\gamma_3$	$-\gamma_5$	$-\gamma_3$
$i = 3$	$-\gamma_1$	$-\gamma_2$	$-\gamma_1$	$-\gamma_5$	$-\gamma_3$	$-\gamma_4$	$-\gamma_4$	$-\gamma_3$	$-\gamma_5$
$i = 4$	γ_1	γ_1	$-\gamma_2$	γ_3	$-\gamma_5$	γ_3	$-\gamma_5$	γ_4	γ_4
$i = 5$	$-\gamma_2$	γ_1	γ_1	γ_4	γ_4	$-\gamma_5$	γ_3	$-\gamma_5$	γ_3
$i = 6$	γ_1	$-\gamma_2$	γ_1	$-\gamma_5$	γ_3	γ_4	γ_4	γ_3	$-\gamma_5$
$i = 7$	$-\gamma_1$	γ_2	γ_1	γ_5	γ_3	$-\gamma_4$	γ_4	$-\gamma_3$	γ_5
$i = 8$	γ_2	$-\gamma_1$	γ_1	$-\gamma_4$	γ_4	γ_5	γ_3	γ_5	$-\gamma_3$
$i = 9$	γ_1	γ_2	$-\gamma_1$	γ_5	$-\gamma_3$	γ_4	$-\gamma_4$	γ_3	γ_5
$i = 10$	γ_2	γ_1	$-\gamma_1$	γ_4	$-\gamma_4$	γ_5	$-\gamma_3$	γ_5	γ_3
$i = 11$	γ_1	$-\gamma_1$	γ_2	$-\gamma_3$	γ_5	γ_3	γ_5	γ_4	$-\gamma_4$
$i = 12$	$-\gamma_1$	γ_1	γ_2	γ_3	γ_5	$-\gamma_3$	γ_5	$-\gamma_4$	γ_4

además $\Phi_{123}^i = \gamma_6$ para $i = 1, \dots, 12$. También, definimos

$$\begin{aligned}\gamma_1 &= 27c_5 A_5 + 9d_5 B_5 \\ \gamma_2 &= c_5 A_5 + 3d_5 B_5 \\ \gamma_3 &= 27c_5 A_5 + 3d_5 B_5 \\ \gamma_4 &= 3c_5 A_5 + 3d_5 B_5 \\ \gamma_5 &= 9c_5 A_5 + d_5 B_5 \\ \gamma_6 &= -9c_5 A_5\end{aligned}$$

las constantes c_k , A_k , d_k y B_k se definen en el capítulo 2.

VECTORES DE POSICIÓN

En la siguiente tabla, presentamos los vectores de posición de los primeros, terceros y quintos vecinos que aparecen en el artículo de Hermann.

	1 ^o s vecinos
$\mathbf{R}(\delta_1, 1 0, 0)$	$\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_3$
$\mathbf{R}(\delta_2, 1 0, 0)$	$-\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_3$
$\mathbf{R}(\delta_3, 1 0, 0)$	$\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2 - \mathbf{e}_3$
$\mathbf{R}(\delta_4, 1 0, 0)$	$-\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 - \mathbf{e}_3$

	3 ^o s vecinos
$\mathbf{R}(\tau_1, 1 0, 0)$	$\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2 + 3\mathbf{e}_3$
$\mathbf{R}(\tau_2, 1 0, 0)$	$\mathbf{e}_1 - 3\mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_3$
$\mathbf{R}(\tau_3, 1 0, 0)$	$3\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_3$
$\mathbf{R}(\tau_4, 1 0, 0)$	$-\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 + 3\mathbf{e}_3$
$\mathbf{R}(\tau_5, 1 0, 0)$	$-\mathbf{e}_1 + 3\mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_3$
$\mathbf{R}(\tau_6, 1 0, 0)$	$-3\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_3$
$\mathbf{R}(\tau_7, 1 0, 0)$	$\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 - 3\mathbf{e}_3$
$\mathbf{R}(\tau_8, 1 0, 0)$	$3\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 - \mathbf{e}_3$
$\mathbf{R}(\tau_9, 1 0, 0)$	$\mathbf{e}_1 + 3\mathbf{e}_2 - \mathbf{e}_3$
$\mathbf{R}(\tau_{10}, 1 0, 0)$	$-\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2 - 3\mathbf{e}_3$
$\mathbf{R}(\tau_{11}, 1 0, 0)$	$-3\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2 - \mathbf{e}_3$
$\mathbf{R}(\tau_{12}, 1 0, 0)$	$-\mathbf{e}_1 - 3\mathbf{e}_2 - \mathbf{e}_3$

	5 ^o s vecinos
$\mathbf{R}(\rho_1, 1 0, 0)$	$3\mathbf{e}_1 + 3\mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_3$
$\mathbf{R}(\rho_2, 1 0, 0)$	$\mathbf{e}_1 + 3\mathbf{e}_2 + 3\mathbf{e}_3$
$\mathbf{R}(\rho_3, 1 0, 0)$	$3\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 + 3\mathbf{e}_3$
$\mathbf{R}(\rho_4, 1 0, 0)$	$-3\mathbf{e}_1 - 3\mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_3$
$\mathbf{R}(\rho_5, 1 0, 0)$	$\mathbf{e}_1 - 3\mathbf{e}_2 - 3\mathbf{e}_3$
$\mathbf{R}(\rho_6, 1 0, 0)$	$-3\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 - 3\mathbf{e}_3$
$\mathbf{R}(\rho_7, 1 0, 0)$	$3\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2 - 3\mathbf{e}_3$
$\mathbf{R}(\rho_8, 1 0, 0)$	$-\mathbf{e}_1 + 3\mathbf{e}_2 - 3\mathbf{e}_3$
$\mathbf{R}(\rho_9, 1 0, 0)$	$-3\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2 + 3\mathbf{e}_3$
$\mathbf{R}(\rho_{10}, 1 0, 0)$	$-\mathbf{e}_1 - 3\mathbf{e}_2 + 3\mathbf{e}_3$
$\mathbf{R}(\rho_{11}, 1 0, 0)$	$-3\mathbf{e}_1 + 3\mathbf{e}_2 - \mathbf{e}_3$
$\mathbf{R}(\rho_{12}, 1 0, 0)$	$3\mathbf{e}_1 - 3\mathbf{e}_2 - \mathbf{e}_3$

APÉNDICE E

En el capítulo 3, presentamos el modelo de Wanser y Wallis para ajustar las curvas de dispersión de sólidos con estructura de diamante. Calculamos las contribuciones a la matriz dinámica provenientes de las interacciones centrales de primeros hasta quintos vecinos (éstas últimas no calculadas en el trabajo original de Wanser [Wanser, 1982]). En el camino, usamos las matrices de las constantes de fuerza. El propósito de este apéndice es presentar la forma explícita de las matrices que Wanser obtuvo, mas las obtenidas en este trabajo. Las agruparemos en matrices de primeros hasta quintos vecinos.

MATICES CORRESPONDIENTES A PRIMEROS VECINOS

Las cuatro matrices se calculan a partir de su definición :

$$\phi_{\alpha\beta}(l\kappa|l'\kappa') = \left\{ \frac{x_\alpha x_\beta}{r^2} [\phi''_{\kappa\kappa'}(r) - \frac{1}{r} \phi'_{\kappa\kappa'}(r)] + \frac{\delta_{\alpha\beta}}{r} \phi'_{\kappa\kappa'}(r) \right\} \Big|_{\mathbf{r}=\mathbf{R}(l\kappa|l'\kappa')} \quad (\text{E.1})$$

obteniéndose

$$\phi(0,0|\delta_1,1) = \begin{pmatrix} \alpha & \beta & \beta \\ \beta & \alpha & \beta \\ \beta & \beta & \alpha \end{pmatrix} \quad \phi(0,0|\delta_2,1) = \begin{pmatrix} \alpha & \beta & -\beta \\ \beta & \alpha & -\beta \\ -\beta & -\beta & \alpha \end{pmatrix}$$

$$\phi(0,0|\delta_3,1) = \begin{pmatrix} \alpha & -\beta & -\beta \\ -\beta & \alpha & \beta \\ -\beta & \beta & \alpha \end{pmatrix} \quad \phi(0,0|\delta_4,1) = \begin{pmatrix} \alpha & -\beta & \beta \\ -\beta & \alpha & -\beta \\ \beta & -\beta & \alpha \end{pmatrix}$$

en donde

$$\alpha = \frac{1}{3} \phi_1''(r_0) + \frac{2}{3r_0} \phi_1'(r_0)$$

$$\beta = \frac{1}{3} \phi_1''(r_0) - \frac{1}{3r_0} \phi_1'(r_0)$$

MATICES CORRESPONDIENTES A SEGUNDOS VECINOS

A partir de la ecuación (E.1), calculamos este conjunto de matrices. Las constantes de fuerza se evalúan en la distancia de segundos vecinos r_2 :

$$\phi(0,0|\mu_1,0) = \begin{pmatrix} \mu & \nu & 0 \\ \nu & \mu & 0 \\ 0 & 0 & \lambda \end{pmatrix} \quad \phi(0,0|\mu_2,0) = \begin{pmatrix} \lambda & 0 & 0 \\ 0 & \mu & \nu \\ 0 & \nu & \mu \end{pmatrix}$$

$$\phi(0,0|\mu_3,0) = \begin{pmatrix} \mu & 0 & \nu \\ 0 & \lambda & 0 \\ \nu & 0 & \mu \end{pmatrix} \quad \phi(0,0|\mu_4,0) = \begin{pmatrix} \mu & -\nu & 0 \\ -\nu & \mu & 0 \\ 0 & 0 & \lambda \end{pmatrix}$$

$$\phi(0,0|\mu_5,0) = \begin{pmatrix} \lambda & 0 & 0 \\ 0 & \mu & -\nu \\ 0 & -\nu & \mu \end{pmatrix} \quad \phi(0,0|\mu_6,0) = \begin{pmatrix} \mu & 0 & -\nu \\ 0 & \lambda & 0 \\ -\nu & 0 & \mu \end{pmatrix}$$

en las matrices anteriores, definimos

$$\begin{aligned} \mu &= \frac{1}{2} \left(\phi_2''(r_2) + \frac{\phi_2'(r_2)}{r_2} \right) \\ \nu &= \frac{1}{2} \left(\phi_2''(r_2) - \frac{\phi_2'(r_2)}{r_2} \right) \\ \lambda &= \mu - \nu \end{aligned}$$

MATRICES CORRESPONDIENTES A TERCEROS VECINOS

En este caso, las constantes de fuerza se evalúan en la distancia de terceros vecinos. Por simplicidad, abreviaremos $\phi(0,0|\tau_i,1) = \phi(\tau_i,1)$ Las matrices son:

$$\phi(\tau_1,1) = \begin{pmatrix} \mu' & -\nu' & \delta' \\ -\nu' & \mu' & -\delta' \\ \delta' & -\delta' & \lambda' \end{pmatrix} \quad \phi(\tau_2,1) = \begin{pmatrix} \mu' & -\delta' & \nu' \\ -\delta' & \lambda' & -\delta' \\ \nu' & -\delta' & \mu' \end{pmatrix}$$

$$\phi(\tau_3,1) = \begin{pmatrix} \lambda' & -\delta' & \delta' \\ -\delta' & \mu' & -\nu' \\ \delta' & -\nu' & \mu' \end{pmatrix} \quad \phi(\tau_4,1) = \begin{pmatrix} \mu' & -\nu' & -\delta' \\ -\nu' & \mu' & \delta' \\ -\delta' & \delta' & \lambda' \end{pmatrix}$$

$$\phi(\tau_5,1) = \begin{pmatrix} \mu' & -\delta' & -\nu' \\ -\delta' & \lambda' & \delta' \\ -\nu' & \delta' & \mu' \end{pmatrix} \quad \phi(\tau_6,1) = \begin{pmatrix} \lambda' & -\delta' & -\delta' \\ -\delta' & \mu' & \nu' \\ -\delta' & \nu' & \mu' \end{pmatrix}$$

$$\phi(\tau_7,1) = \begin{pmatrix} \mu' & \nu' & -\delta' \\ \nu' & \mu' & -\delta' \\ -\delta' & -\delta' & \lambda' \end{pmatrix} \quad \phi(\tau_8,1) = \begin{pmatrix} \lambda' & \delta' & -\delta' \\ \delta' & \mu' & -\nu' \\ -\delta' & -\nu' & \mu' \end{pmatrix}$$

$$\phi(\tau_9,1) = \begin{pmatrix} \mu' & \delta' & -\nu' \\ \delta' & \lambda' & -\delta' \\ -\nu' & -\delta' & \mu' \end{pmatrix} \quad \phi(\tau_{10},1) = \begin{pmatrix} \mu' & \nu' & \delta' \\ \nu' & \mu' & \delta' \\ \delta' & \delta' & \lambda' \end{pmatrix}$$

$$\phi(\tau_{11}, 1) = \begin{pmatrix} \lambda' & \delta' & \delta' \\ \delta' & \mu' & \nu' \\ \delta' & \nu' & \mu' \end{pmatrix} \quad \phi(\tau_{12}, 1) = \begin{pmatrix} \mu' & \delta' & \nu' \\ \delta' & \lambda' & \delta' \\ \nu' & \delta' & \mu' \end{pmatrix}$$

en donde, definimos

$$\begin{aligned} \mu' &= \frac{1}{11} \left[\phi_3''(r_3) + \frac{10}{r_3} \phi_3'(r_3) \right] \\ \nu' &= \frac{1}{11} \left[\phi_3''(r_3) - \frac{1}{r_3} \phi_3'(r_3) \right] \\ \delta' &= 3\nu' \\ \lambda' &= \mu' + 8\nu' \end{aligned}$$

MATRICES CORRESPONDIENTES A CUARTOS VECINOS

De manera similar, encontramos las matrices siguientes (las constantes de fuerza se evalúan en la distancia de cuartos vecinos)

$$\phi(0, 0|\lambda_1, 0) = \begin{pmatrix} \lambda'' & 0 & 0 \\ 0 & \mu'' & 0 \\ 0 & 0 & \mu'' \end{pmatrix} \quad \phi(0, 0|\lambda_2, 0) = \begin{pmatrix} \mu'' & 0 & 0 \\ 0 & \lambda'' & 0 \\ 0 & 0 & \mu'' \end{pmatrix}$$

$$\phi(0, 0|\lambda_3, 0) = \begin{pmatrix} \mu'' & 0 & 0 \\ 0 & \mu'' & 0 \\ 0 & 0 & \lambda'' \end{pmatrix}$$

en las matrices anteriores

$$\begin{aligned} \mu'' &= \frac{\phi_4'(r_4)}{r_4} \\ \lambda'' &= \phi_4''(r_4) \end{aligned}$$

MATRICES CORRESPONDIENTES A QUINTOS VECINOS

Estas matrices no habían sido previamente obtenidas. Nuevamente, abreviaremos $\phi(0, 0|\rho_i, 1) = \phi(\rho_i, 1)$. De este modo, las matrices resultan

$$\phi(\rho_1, 1) = \begin{pmatrix} \mu''' & \nu''' & \delta''' \\ \nu''' & \mu''' & \delta''' \\ \delta''' & \delta''' & \lambda''' \end{pmatrix} \quad \phi(\rho_2, 1) = \begin{pmatrix} \lambda''' & \delta''' & \delta''' \\ \delta''' & \mu''' & \nu''' \\ \delta''' & \nu''' & \mu''' \end{pmatrix}$$

$$\phi(\rho_3, 1) = \begin{pmatrix} \mu''' & \delta''' & \nu''' \\ \delta''' & \lambda''' & \delta''' \\ \nu''' & \delta''' & \mu''' \end{pmatrix} \quad \phi(\rho_4, 1) = \begin{pmatrix} \mu''' & \nu''' & -\delta''' \\ \nu''' & \mu''' & -\delta''' \\ -\delta''' & -\delta''' & \lambda''' \end{pmatrix}$$

$$\phi(\rho_5, 1) = \begin{pmatrix} \lambda''' & -\delta''' & -\delta''' \\ -\delta''' & \mu''' & \nu''' \\ -\delta''' & \nu''' & \mu''' \end{pmatrix}$$

$$\phi(\rho_6, 1) = \begin{pmatrix} \mu''' & -\delta''' & \nu''' \\ -\delta''' & \lambda''' & -\delta''' \\ \nu''' & -\delta''' & \mu''' \end{pmatrix}$$

$$\phi(\rho_7, 1) = \begin{pmatrix} \mu''' & -\delta''' & -\nu''' \\ -\delta''' & \lambda''' & \delta''' \\ -\nu''' & \delta''' & \mu''' \end{pmatrix}$$

$$\phi(\rho_8, 1) = \begin{pmatrix} \lambda''' & -\delta''' & \delta''' \\ -\delta''' & \mu''' & -\nu''' \\ \delta''' & -\nu''' & \mu''' \end{pmatrix}$$

$$\phi(\rho_9, 1) = \begin{pmatrix} \mu''' & \delta''' & -\nu''' \\ \delta''' & \lambda''' & -\delta''' \\ -\nu''' & -\delta''' & \mu''' \end{pmatrix}$$

$$\phi(\rho_{10}, 1) = \begin{pmatrix} \lambda''' & \delta''' & -\delta''' \\ \delta''' & \mu''' & -\nu''' \\ -\delta''' & -\nu''' & \mu''' \end{pmatrix}$$

$$\phi(\rho_{11}, 1) = \begin{pmatrix} \mu''' & -\nu''' & \delta''' \\ -\nu''' & \mu''' & -\delta''' \\ \delta''' & -\delta''' & \lambda''' \end{pmatrix}$$

$$\phi(\rho_{12}, 1) = \begin{pmatrix} \mu''' & -\nu''' & -\delta''' \\ -\nu''' & \mu''' & \delta''' \\ -\delta''' & \delta''' & \lambda''' \end{pmatrix}$$

en lo anterior, definimos

$$\mu''' = \frac{9}{19}\phi_5''(r_5) + \frac{10}{19r_5}\phi_5'(r_5)$$

$$\nu''' = \frac{9}{19}\left[\phi_5''(r_5) - \frac{1}{r_5}\phi_5'(r_5)\right]$$

$$\delta''' = \frac{1}{3}\nu'''$$

$$\lambda''' = \frac{1}{19}\phi_5''(r_5) + \frac{18}{19r_5}\phi_5'(r_5)$$

REFERENCIAS

- [**Arfken, 1974**]: G. B. Arfken, *Mathematical Methods for Physicists*, Academic Press (1970)
- [**Ashcroft and Mermin, 1976**]: N. W. Ashcroft, and N. D. Mermin, *Solid State Physics*, Holt, Rinehart and Winston (1976)
- [**Bhandari and Jindal, 1992**]: R. Bhandari and V.K. Jindal, *Phys. Rev. B* **46**, 10693 (1992)
- [**Born and Huang, 1962**]: M. Born and K. Huang, *Dynamical theory of crystal lattices*, Clarendon, Oxford Press University (1962)
- [**Cowley, 1965**]: R. A. Cowley, *Le Journal de Physique* **26**, 659 (1965)
- [**Dirac, 1954**]: Dirac, P. A. M., *Quantum Mechanics*, Oxford University Press (1954)
- [**Haro, 1986**]: E. Haro, M. Balkanski, R. F. Wallis and K. H. Wanser, *Phys. Rev. B* **34**, 5358 (1986)
- [**Haro, 1986b**]: E. Haro, *Étude expérimentale et théorique de l'anharmonicité dans le silicium*, Tesis de Doctorado de Estado, Université Pierre et Marie Curie (1986)
- [**Held and Pfeiffer, 1994**]: Th. Held and I. Pfeiffer, *Phys. Stat. Sol. (B)* **181**, 363 (1994)
- [**Herman, 1959**]: F. Herman, *J. Phys. Chem. Solids* **8**, 405 (1959). En este artículo se encuentran los vectores de posición de los vecinos cercanos para el Silicio.
- [**Jones and March, 1985**]: W. Jones and N. H. March, *Theoretical Solid State Physics, Vol. 1 : Perfect lattices in equilibrium*, Dover edition (1985)
- [**Kittel, 1971**]: C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, 4th ed., Wiley (1971)
- [**Klemens, 1966**]: P. G. Klemens, *Phys. Rev.* **148**, 845 (1966)
- [**Koval and Migoni, 1994**]: S. Koval and R. Migoni, *Phys. Rev. B* **49**, 998 (1994)
- [**Lax, 1973**]: M. Lax, *Symmetry Principles in Solid State and Molecular Physics*, Wiley (1973)
- [**Maradudin and Fein, 1962**]: A. A. Maradudin and A. E. Fein, *Phys. Rev.* **128**, 2589 (1962)
- [**Maradudin and Horton, 1973**]: A. A. Maradudin and G. K. Horton, *Dynamical Properties of solids*, Vol. 1, North Holland (1973)
- [**Maradudin et al, 1963**]: A. A. Maradudin, E. W. Montroll and G. H. Weiss, *Solid State Physics* **3**, 231 (1963) Supplement
- [**Maradudin and Ipatova**]: A. A. Maradudin and I. P. Ipatova, *J. Math. Phys.* **9**, 525 (1968)

- [**Menéndez and Cardona, 1984**]: J. Menéndez and M. Cardona, *Phys. Rev. B***29**, 2051 (1984)
- [**Nilsson and Nelin, 1972**]: G. Nilsson, and G. Nelin, *Phys. Rev. B***6**, 3777 (1972)
- [**Peierls, 1965**]: R. E. Peierls, *Quantum Theory of Solids*, Oxford University Press, Oxford (1965)
- [**Reissland, 1973**]: J. A. Reissland, *The Physics of phonons*, Wiley (1973)
- [**Shobhana and Vanderbilt, 1994**]: Shobhana Narasimhan and David Vanderbilt, *Phys. Rev. B***43**, 4541 (1991)
- [**Smith, 1948**]: H. M. J. Smith, *Phil. Trans. Roy. Soc. A***241**, 105 (1948)
- [**Tang, 1994**]: H. Tang and I. P. Herman, *Phys. Rev. B***43**, 2299 (1991)
- [**Wang, 1990**]: C. Z. Wang, C. T. Chan and K. M. Ho, *Phys. Rev. B***42**, 11276 (1990). En este artículo se estudia el modelo de enlace fuerte (*tight binding*) mediante una dinámica molecular.
- [**Wanser, 1982**]: K. H. Wanser, *Harmonic and anharmonic properties of diamond structure crystals with application to the calculation of thermal expansion of Silicon*, Tesis de Doctorado, University of California at Irvine (1982)
- [**Weber, 1977**]: W. Weber, *Phys. Rev. B***15**, 4789 (1977). Se presenta el modelo de *bond charge*.