INSTITUTO DE FÍSICA

FACULTAD DE INGENIERÍA

PROPIEDADES ÓPTICAS DE MATERIALES

Curso 2025

Práctico II – Materia.

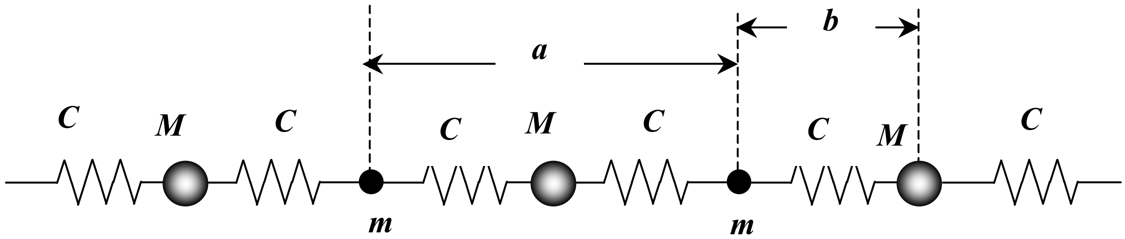
Fecha de Entrega: 25 de Abril de 2025. [1]

Ejercicio N^o 1 (*) – Cadena Lineal Diatómica.

Considere una cadena lineal diatómica, con átomos de masas m y M, en principio diferentes, en donde se puede suponer que: $m < M$. Los átomos (en reposo) se encuentran ubicados periódicamente (período espacial a), y distan b entre ellos ($b < a$). La constante de la fuerza armónica entre átomos vecinos es C. Asuma amplitudes de desplazamientos diferentes para los átomos de masas diferentes, del tipo:

$$u_s = u_0 \, exp[-i(\omega t - ska)]; \; v_s = v_0 \, exp[-i(\omega t - ska)]$$

siendo ω la pulsación, k el vector de la onda de vibración que se propaga por el material, s un índice entero (que refiere a la celda elemental que posee solo dos átomos de masas diferentes), y u y v los desplazamientos a partir de la posición de equilibrio de los átomos de un tipo u otro, respectivamente.



a) Verifique que los modos normales de oscilación se hallan anulando el determinante:

$$\begin{vmatrix} 2C - \omega^2 m & -C[1 + exp(-ika)] \\ -C[1 + exp(ika)] & 2C - \omega^2 M \end{vmatrix} = 0$$

En consecuencia:

i. Encuentre la ecuación que permite hallar la relación de dispersión $\omega^2(k)$.

ii. ¿Cuántas soluciones aceptables existen para un determinado valor de k?

b) Encuentre formas aproximadas para esas relaciones de dispersión en la región de longitudes de onda muy grandes ($ka << 1$), y demuestre que:

---

[1] - La entrega mínima debe contener los ejercicios marcados con asterisco, que en este repartido son: Ejercicios N^o 1, 2 y 5. No es obligatorio entregar las partes indicadas como opcionales pues pueden requerir cálculos más extensos.

i. Existe una solución, denominada rama "acústica", en que la relación de dispersión $\omega(k)$ es similar a la de fotones viajando en el vacío. [2]

ii. Existe otra solución, denominada rama "óptica", en que la relación de dispersión $\omega(k)$ posee un máximo en $k \equiv 0$. [3]

iii. Calcule las velocidades de grupo de las ramas de "fonones" acústicos y ópticos cerca del centro de la Primer Zona de Brillouin. ¿Cómo se relacionaría la primera con la velocidad de propagación del sonido y cuál es el signo de la segunda?

iv. Halle la relación entre las amplitudes de vibración de cada átomo u_0/v_0 para las dos ramas (acústica y óptica) cerca del centro de la Primer Zona de Brillouin. Si, además de masas diferentes, los átomos que forman la red, tienen cargas iguales y opuestas: ¿En qué caso será más importante el momento dipolar de cada celda unitaria generado por el movimiento oscilatorio de los átomos? [4]

c) Encuentre, en forma aproximada, las relaciones de dispersión halladas en la parte a) en el límite en que $k \approx k_{\text{máx}} = \pi/a$ (o sea límite $k \to \pi/a$ con $k < \pi/a$).[5] Bajo esta aproximación:

i. Halle la relación entre las amplitudes de vibración de cada átomo u_0/v_0 para las dos ramas en ese caso límite. Demuestre que para $k = \pi/a$ las redes correspondientes a cada tipo de átomo se comportan como si no estuvieran acopladas; una red permanece en reposo mientras que la otra se mueve.

ii. (Opcional) Compare la solución para las vibraciones de una cadena monoatómica con la de una cadena diatómica, cuando los átomos son idénticos entre sí y se encuentran equidistantes (siendo el período de esta última el doble de la primera).

Ejercicio N° 2 (*) – Modo vibracional localizado en un defecto.

Considere una cadena lineal monoatómica infinita, de átomos de masa M y acoplamiento de primeros vecinos C. En el origen de coordenadas (correspondiente al índice $s = 0$) la cadena posee un *defecto* o *impureza sustitucional* de masa m (es decir: un átomo de masa $m \neq M$ se encuentra en la posición del átomo de masa M que debía estar en ese lugar).

a) Escriba las ecuaciones de movimiento para la impureza sustitucional ($s = 0$) y alguno de sus primeros vecinos ($s = 1$ o $s = -1$).

b) Escriba las ecuaciones que se obtienen al buscar soluciones de ondas localizadas, es decir soluciones del tipo:

[2] En este caso se trata de ondas de sonido viajando en el material.
[3] Al punto k = 0 se le denomina centro de la Primer Zona de Brillouin, que corresponde a ondas con periodicidad infinitamente grande.
[4] La interacción del dipolo eléctrico así formado con un campo electromagnético externo es estudiado con más detalle en el Ejercicio No 3 – Absorción Infrarroja.
[5] Al punto $k = \pi/a$ se le denomina Borde de la Primer Zona de Brillouin, y corresponde a las ondas con menor longitud de onda que pueden ser "vistas" con posiciones discretas a intervalos a.

$$u_s = u_0\, exp\left(-\alpha(\omega)|s| - i\omega t\right)$$

NOTA: Si $Re(\alpha(\omega)) > 0$ esto corresponde a una oscilación localizada cuya amplitud es máxima en la posición del defecto (s = 0).

c) Encuentre la frecuencia de oscilación propia ω_0 del estado localizado escribiéndola en función de la frecuencia máxima de la cadena lineal infinita: $\omega_m = \sqrt{\frac{4C}{M}}$ y la relación de masas $\lambda = {}^{m}\!/\!_{M}$.

d) Grafique $\omega_0(\lambda)$ discutiendo:

   i. ¿para qué valores de λ existen vibraciones localizadas?

   ii. ¿cómo son los valores de ω_0 en comparación con ω_m ?

e) Halle los valores de $\alpha(\omega)$ en función de λ verificando cuándo son efectivamente modos localizados; es decir, $Re(\alpha(\omega)) > 0$.

Ejercicio N° 3 – Absorción Infrarroja:

Considere la respuesta de un cristal lineal diatómico a la radiación electromagnética en el infrarrojo. Suponga el cristal formado por iones de masas *m* y *M* con carga opuesta *q* y – *q* y que solo hay interacción elástica de primeros vecinos, con constante *C*.[6] El campo eléctrico puede suponerse:

$$E = E_0\, exp[i(kx - \omega t)]$$

y se desprecia la parte magnética.

a) Escriba como se modifican las ecuaciones de movimiento de la red diatómica forzada por la acción del campo.

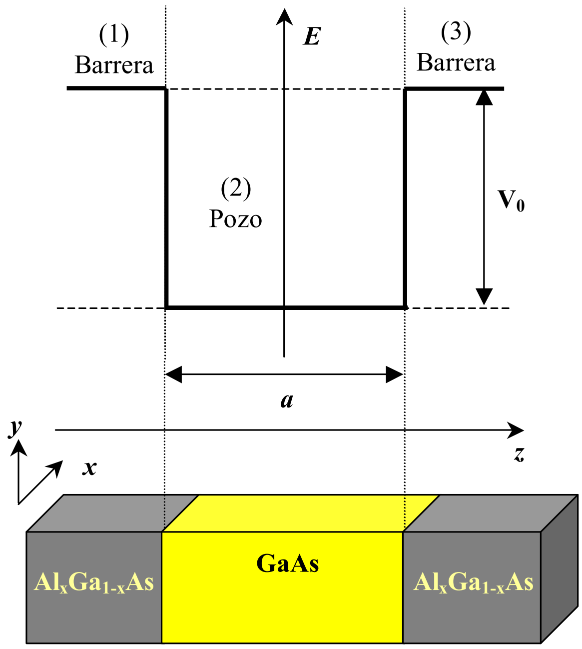
b) Si la onda electromagnética se encuentra en la región de ondas del infrarrojo $\lambda = 1 - 100\ \mu m$. Para un cristal con constante de red típica $a \sim 5$ Å, compare el vector de onda del campo electromagnético con el borde de la zona de Brillouin. Deduzca que la respuesta del material se dará en el centro de la zona de Brillouin, por lo que es razonable suponer $k \cong 0$.

c) Bajo la aproximación anterior resuelva los desplazamientos atómicos en función del campo eléctrico y observe que poseen resonancias para $\omega_0 = \sqrt{2\beta\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right)}$, correspondiente al valor de la rama de fonones "ópticos" en el centro de la zona de Brillouin.

[6] - Vea Ejercicio No 1 (*) – Cadena Lineal Diatómica.

Ejercicio Nº 4 – Pozo Cuántico Semiconductor ("Quantum Well")

Considere una heteroestructura de $Al_xGa_{1-x}As/GaAs/Al_xGa_{1-x}As$, que consiste en una capa de GaAs entre dos secciones semi-infinitas de $Al_xGa_{1-x}As$. Debido a los diferentes gaps de energía de GaAs y $Al_xGa_{1-x}As$ $\left(E_g^{[GaAs]} < E_g^{[Al_xGa_{1-x}As]}(x)\right)$, los electrones de conducción se encuentran "*confinados*" en la región del GaAs. Le llamamos z a la dirección perpendicular a la interfaz entre los materiales. En esa dirección z los portadores se encuentran en un pozo de potencial simétrico, de barrera finita, como el de la figura. Llamémosle a al ancho espacial del pozo y V_0 al alto de la barrera de potencial. En las direcciones perpendiculares a z los portadores se mueven libremente.



a) Partiendo de la ecuación de Schröedinger de estado estacionario:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2\Psi + V\Psi = E\Psi \qquad (1)$$

donde m^* es la masa efectiva de los electrones, supuesta la misma en ambos materiales, $\hbar$ la constante de Planck, V es el potencial en que el electrón en estudio se mueve y E la energía total del mismo.

Demuestre que, debido a que el potencial de confinamiento (de la figura) solamente depende de z, la ecuación anterior es de variables separables y su solución puede escribirse como:

$$\Psi = \phi(x,y)\,\psi(z) \qquad (2)$$

siendo $\phi(x,y)$ una onda plana bidimensional:

$$\phi(x,y) \propto exp\left[\pm i\left(k_x x + k_y y\right)\right] \qquad (3)$$

y $\psi(z)$ verifica una ecuación diferencial de pozo de potencial finito:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2\psi}{dz^2} + V(z)\psi = E_0\psi \qquad (4)$$

donde:

$$E_0 = E - \frac{\hbar^2}{2m^*}\left(k_x^{\ 2} + k_y^{\ 2}\right) \qquad (5)$$

o sea, E_0 es la energía total en el caso que $k_x = k_y = 0$.

b) Demuestre que existen dos tipos de soluciones para la ecuación 4 de un pozo de potencial finito, cuya existencia está dada por las condiciones: [7]

$$k_1 = k_2 \; tg\left(\frac{k_2 a}{2}\right) \qquad (6)$$

$$-k_1 = k_2 \; cot\, g\left(\frac{k_2 a}{2}\right) \qquad (7)$$

siendo:

$$k_1 \equiv \sqrt{\frac{2m^*(V_0 - E_0)}{\hbar^2}} \qquad (8)$$

$$k_2 \equiv \sqrt{\frac{2m^* E_0}{\hbar^2}} \qquad (9)$$

c) Estudiando gráficamente las ecuaciones (6) y (7) en función de k_2 y $\alpha \equiv 2m^*\left(\frac{a}{\hbar}\right)^2 V_0$ como parámetro, demuestre que:

i. Existe un número finito de soluciones.

ii. Si $\alpha \to \infty$ las soluciones se acercan a las del pozo infinito:

$$E_0 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m^* a^2} n^2 \;\; \text{con}\; n = 1,2,\ldots \qquad (10)$$

Interprete físicamente los dos casos en que se da este límite.

iii. Existe un valor crítico α_{crit}, tal que si $\alpha < \alpha_{crit}$ existirá una única solución.

iv. Halle en forma aproximada y grafique la energía de la solución para $\alpha \to 0$.

d) Asumiendo de aquí en más un pozo de potencial infinito $(V_0 \to \infty)$, grafique la dependencia de la energía total E en función del módulo del vector de onda en el plano del Pozo Cuántico $k_\perp = \sqrt{k_x{}^2 + k_y{}^2}$. Utilice para ello la ecuación (5) y considere solamente los niveles de menor energía E_0 asociados al pozo de potencial. Interprete estos resultados como la aparición de "*subbandas*" de energía asociadas a cada estado confinado en el pozo de potencial.

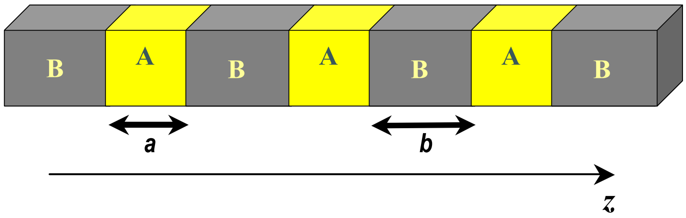
e) Considerando que las dimensiones laterales del pozo de potencial son L_x, L_y >> a; calcule y grafique la "*densidad de estados*" de las subbandas halladas en la parte anterior, en función de la energía total del electrón E. Demuestre que e una función escalonada que en los valores correspondientes a la ecuación (10) toma los valores de la densidad de estados tridimensional evlauada en estas energías. [8]

<u>NOTA</u>: Tenga en cuenta que la condición a << L_x, L_y nos permite considerar el problema como bidimensional.

---

[7] - The Physics of Semiconductors, K. F. Brennan, Secc. 2.3.
[8] - Ver Ejercicio No 5 del Práctico I.

Ejercicio N° 5 (*) – Modelo de Kronig-Penney en SuperRedes.



Considere el problema de las condiciones de borde en una SuperRed semiconductora. Se trata de una *heteroestructura* semiconductora en el que se alternan periódicamente capas de materiales diferentes . . A / B / A / B . .; donde los materiales que se alternan son por ejemplo $Al_xGa_{1-x}As$ y GaAs. Debido a los diferentes gaps de energía del GaAs y $Al_xGa_{1-x}As$ $\left(E_g^{[GaAs]} < E_g^{[Al_xGa_{1-x}As]}(x)\right)$, los electrones de conducción ven un potencial periódico de tipo Kronig-Penney. Teniendo en cuenta este modelo para un pozo de potencial periódico cuadrado unidimensional [9] las condiciones de borde pueden escribirse como:

$$-\frac{\alpha^2+\beta^2}{2\alpha\beta}\,sen(\alpha a)\,sen(\beta b)+cos(\alpha a)\,cos(\beta b)=cos(k(a+b)) \qquad (11)$$ [10]

donde:

$$\alpha=\sqrt{\frac{2m^*E}{\hbar^2}};\quad \beta=\sqrt{\frac{2m^*(E-V_0)}{\hbar^2}}$$

E son los niveles de energía permitidos;

V_0 es la altura de la barrera de potencial, originada en la diferencia entre los gaps de energía en el material;

m^* es la masa efectiva de los electrones que se mueven en dicha SuperRed (considerada la misma en uno y otro material);

a es el ancho de los pozos y b el de las barreras;

k es el número de onda del electrón de Bloch (asociado a la denominada cantidad de movimiento del cristal $\hbar k$, donde $\hbar$ es la constante de Planck);

a) Demuestre que las relaciones de dispersión $E(k)$ se pueden hallar resolviendo la ecuación inversa:

$$k=\frac{1}{a+b}\arccos(z(E)) \qquad (12)$$

con:

$$z(E)=\sqrt{\left[1+\frac{V_0^{\,2}}{4E(E-V_0)}\operatorname{sen}^2\left(\sqrt{\frac{2m^*(E-V_0)}{\hbar^2}}b\right)\right]}\cos\left(\sqrt{\frac{2m^*E}{\hbar^2}}a+\delta\right);$$

[9] - Se estudiará solamente el movimiento de los electrones en la dirección perpendicular a las interfaces entre los materiales A y B de la figura. Se despreciará el movimiento de los electrones en las direcciones transversales (en los planos de las interfaces).

[10] - Esta ecuación es estrictamente válida para $E > V_0$. En otro caso deberían hacerse las sustituciones $\beta = i\gamma$ (con γ real), y $sen(ix) = i\,sh(x)$, $cos(ix) = i\,ch(x)$.

$$tg\delta = \frac{\left(\alpha^2 + \beta^2\right)}{2\alpha\beta} tg\left(\beta b\right).$$

b) Trabajando en función de las cantidades normalizadas:

$$\varepsilon = \frac{E}{V_0},\ u = k(a+b),\ v = \frac{2m^* V_0 a^2}{\hbar^2},\ r = \frac{b}{a} \qquad (13)$$

realice numéricamente el cálculo de las denominadas "*minibandas*" de energía, $\varepsilon(u)$, graficando los resultados en el esquema de *zona reducida*. Aplique el cálculo a los casos particulares:

i. $v = 144$, $r = 0.1$.

ii. $V_0 = 0.4$ eV, $a = b = 30$ Å, $m^* = m_0 = 9.10956 \times 10^{-31}$ kg.

c) Partiendo de la ecuación (11), demuestre analíticamente que cuando $E >> V_0$ las relaciones de dispersión se aproximan a los de la partícula libre $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$.

Ejercicio N° 6 – Vectores de onda complejos en la banda prohibida.

Consideremos el problema de una partícula moviéndose en un potencial periódico unidimensional, en que la función de onda de Bloch la escribimos como:

$$\psi_k(x) = exp(ikx)\, u_k(x) = exp(ikx) \sum_G b_G\ exp(-iGx) = \sum_G b_G\ exp(i(k-G)x) =$$

$$= \sum_G c_{k-G}\ exp\left(^{i(k-G)x}\right)$$

donde G son los vectores de la red recíproca unidimensional: $G = \frac{2\pi n}{a}$, donde a es la constante de red y n un número entero, y los c_{k-G} son los coeficientes de la expansión en serie de Fourier.

En determinadas condiciones, en la resolución de la ecuación de Scroedinger para una estructura periódica, solo importa el acoplamiento entre algunas ondas planas. Para los estados en el límite de la zona $k = \pm\frac{G}{2}$, solo pueden considerarse relevantes los coeficientes $c_{\frac{G}{2}}$ y $c_{-\frac{G}{2}}$, despreciando todos los demás.

a) Demuestre que en este caso las soluciones quedan determinadas por la ecuación secular:

$$\begin{vmatrix} \lambda_1 - \in & U \\ U & \lambda_2 - \in \end{vmatrix} = 0$$

donde $\in$ es la energía, $\lambda_1 = \lambda_2 = \dfrac{\hbar^2 G^2}{8m}$ y U es el término correspondiente de acoplamiento entre estados.

NOTA: En el caso en que $k \approx \pm\dfrac{G}{2}$ pero no exactamente igual, el resultado sigue siendo válido con $\lambda_1 = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m}$ y $\lambda_2 = \dfrac{\hbar^2 (k-G)^2}{2m}$.

b) Dentro de esta aproximación, halle una expresión para la parte imaginaria del vector de ondas *en el interior de la banda prohibida* en el límite de la primera Zona de Brillouin. Dé el resultado para el valor de $Im(k)$ en el centro de la banda prohibida.

NOTA: El resultado para $Im(k)$ pequeño es:

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)[Im(k)]^2 \approx \frac{2mU^2}{\hbar^2 G^2}$$

Ejercicio N° 7 – Ondas Electromagnéticas en Medios Inhomogéneos. [11]

La dependencia espacial de las ondas planas propagándose en un medio homogéneo es consecuencia de que el sistema es invariante ante traslaciones espaciales. Ondas propagándose en sistemas con otras simetrías tienen características que reflejan estas últimas.

a) Que un sistema sea invariante ante una simetría (definida por un operador de simetría **O**) implica que se verifica la siguiente relación: **Θ = O^{-1}ΘO**, por lo que **O** y **Θ** conmutan.[12]

i. Demuestre que para un modo de propagación no degenerado (es decir, cuyo campo electromagnético $\vec{\mathbf{H}}\left(\vec{\mathbf{r}}\right)$ es el *único* autovector de **Θ** con solución con frecuencia ω), y **Θ** es simétrico respecto a **O**, entonces $\vec{\mathbf{H}}\left(\vec{\mathbf{r}}\right)$ es también autovector de **O**; o sea: $\mathbf{O}\vec{\mathbf{H}}\left(\vec{\mathbf{r}}\right) = \alpha\vec{\mathbf{H}}\left(\vec{\mathbf{r}}\right)$.

ii. Aplique la propiedad anterior al operador inversión **I** definido como $\mathbf{I}\vec{\mathbf{F}}\left(\vec{\mathbf{r}}\right) = \vec{\mathbf{F}}\left(-\vec{\mathbf{r}}\right)$: y demuestre que para este operador α = ± 1. Por lo que si **Θ**

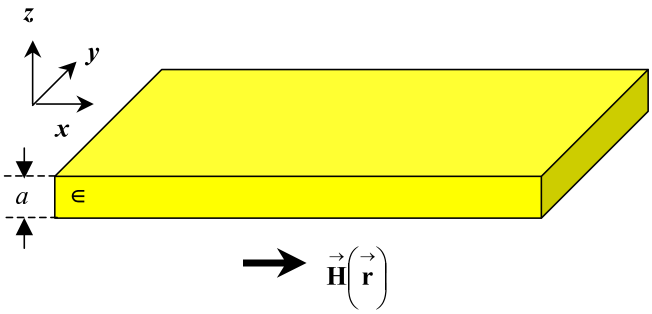
[11] - Continuación de Ejercicio N° 11 del Práctico I.

[12] **Θ = O^{-1}ΘO** implica que si el sistema **Θ** no cambia ante la operación de simetría **O**, es indiferente aplicar esta simetría al sistema, operar sobre él luego de esto, mientras que las coordenadas sean restauradas por el operador de simetría inverso **O^{-1}** sean restauradas con posterioridad.

es invariante ante una inversión los modos electromagnéticos $\vec{\mathbf{H}}\left(\vec{\mathbf{r}}\right)$ son pares o impares.

iii. Si $\mathbf{T}_{\vec{\mathbf{d}}}$ es el operador traslación según un vector $\vec{\mathbf{d}}$, de forma que $\mathbf{T}_{\vec{\mathbf{d}}}\vec{\mathbf{F}}\left(\vec{\mathbf{r}}\right)=\vec{\mathbf{F}}\left(\vec{\mathbf{r}}+\vec{\mathbf{d}}\right)$; verifique que una onda plana de vector de onda $\vec{\mathbf{k}}$ es autovector de $\mathbf{T}_{\vec{\mathbf{d}}}$, con autovalor $exp\left(i\vec{\mathbf{k}}\cdot\vec{\mathbf{d}}\right)$.

b) Aplique los argumentos de simetría de la parte anterior para hallar las relaciones de dispersión de una onda electromagnética en presencia de una película dieléctrica de constante $\in$ y espesor a (supuesta de extensión infinita) ubicada en el vacío. [13] Para hacer ello asuma que el campo magnético está polarizado en la dirección x, según las direcciones definidas en la figura y proceda de la siguiente forma:



i. Muestre que el campo deberá tener la forma: $\vec{\mathbf{H}}\left(\vec{\mathbf{r}}\right)=exp\left(ik_y y\right)\varphi(z)$.

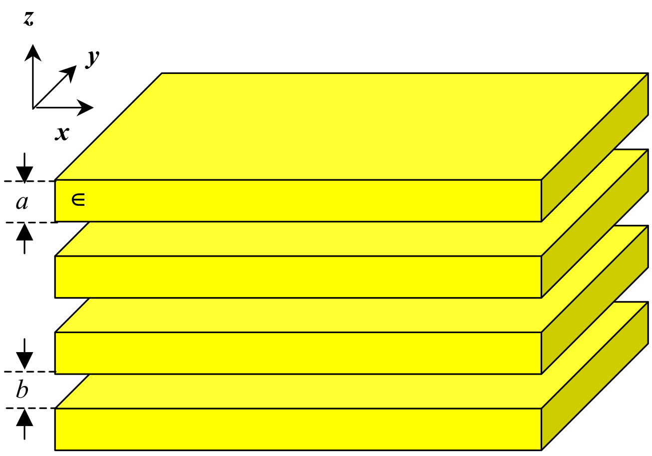
ii. Halle la ecuación que deberá verificar $\varphi(z)$.

iii. Si $\omega > ck_y$ existe un continuo de estados asociados a campos oscilatorios $\varphi(z)\propto exp\left(ik_z z\right)$ (propagación a través de la película delgada).

iv. Si $\omega < ck_y$ existen solo valores discretos de estados de luz confinada en la lámina. El campo en el vacío decae como $\varphi(z)\propto exp(-\kappa z)$ de forma que para k_y grande:

$$\frac{\omega^2}{c^2}\rightarrow\frac{k_y^2}{\in}+\frac{n^2\pi^2}{\in a^2}$$

c) Considere ahora una sucesión infinita de láminas como la anterior ubicadas con un espaciamiento b de manera que el sistema se



[13] - Salvo por el comportamiento vectorial del campo electromagnético las simetrías involucradas son las mismas del Ejercicio No 4 – Pozo Cuántico Semiconductor (“Quantum Well”).

repite según la dirección z con período $c = a + b$. [14]

i. Utilice las simetrías traslacionales para demostrar que $\vec{\mathbf{H}}\left(\vec{\mathbf{r}}\right)$ debe ser autovector de $\mathbf{T}_{\vec{\mathbf{d}}}$ para $\vec{\mathbf{d}} = x\,\hat{\mathbf{e}}_x$, $\vec{\mathbf{d}} = y\,\hat{\mathbf{e}}_y$ y $\vec{\mathbf{d}} = lc\,\hat{\mathbf{e}}_z$ con x, y arbitrario y l entero.

ii. Verifique que en el caso de $\vec{\mathbf{d}} = lc\,\hat{\mathbf{e}}_z$ el autovalor correspondiente es degenerado para $k_z = \dfrac{m2\pi}{c}$.

iii. Sumando para todos los posibles valores de m demuestre que $\vec{\mathbf{H}}\left(\vec{\mathbf{r}}\right)$ se puede escribir como una onda de Bloch:

$$\vec{\mathbf{H}}\left(\vec{\mathbf{r}}\right) = exp\left(i\,\vec{\mathbf{k}}\cdot\vec{\mathbf{r}}\right)u_{n,\vec{\mathbf{k}}}(z).$$

[14] - En este caso las simetrías involucradas son las mismas del Ejercicio Nº 5.