

Universidad Nacional Autónoma de México

Facultad de Ciencias



Efecto de  
Impurezas  
Sobre las  
Vibraciones en  
Redes Cristalinas

T E S I S  
QUE PARA OBTENER EL TITULO DE:  
F I S I C O  
P R E S E N T A  
AGUSTIN MIRANDA GOMEZ

MEXICO, D. F.

1981



Universidad Nacional  
Autónoma de México



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

# I N D I C E

Dedicatorias y Agradecimientos	I
Introducción	1
Capítulo I	5
Espectro de Frecuencias de la Cadena Diatómica Infinita Limpia.	
Capítulo II	16
Modos Localizados en Cadenas Diatómicas Infinitas con Impureza Isotópica	
Capítulo III	
Resultados	26
Conclusiones	46
Bibliografía	49

Los estudios sobre vibraciones de las redes cristalinas en una gran variedad de casos, tanto teórica como experimentalmente han demostrado que las impurezas son autoras del cambio en los tiempos de relajamiento de materiales magnéticos por muchos órdenes de magnitud. Los procesos de transporte tales como la conducción eléctrica y la térmica son frecuentemente controlados por la dispersión de electrones o fonones (partícula asociada con la unidad cuántica de excitación de uno de los modos de vibración elástica de un cristal ideal) por defectos. Los niveles de impureza de semiconductores son el origen de los electrones que pueden efectuar fácilmente transiciones a la banda de conducción y por lo tanto su influencia es dominante en el comportamiento eléctrico de semiconductores. También las impurezas tienen gran importancia en el grado de emisión y absorción óptica; así como la formación de los diferentes tipos de centros sin olvidar el papel importante que juegan en la resistividad eléctrica de algunos materiales.

Centraremos nuestro interés en las vibraciones de la red, ya que el propósito de este trabajo es analizar las modificaciones que sufren tanto en forma como en frecuencia los modos normales de vibración a causa de una impureza isotópica en una cadena diatómica lineal infinita usando el método de la matriz **S** que introdujo Fukuda<sup>1</sup> para estudiar el caso de la cadena lineal monoatómica con impureza isotópica y posteriormente Hori y Asahi<sup>2</sup> al tratar los efectos de superficie en cadenas monoatómicas y diatómicas. Posteriormente este método ha sido usado por Achar y Barsh<sup>3</sup> en la dinámica de la red para estudiar el efecto de un plano de impurezas en un cristal diatómico tridimensional con estructura de sol, de roca e interacciones a primeros vecinos y, nosotros lo usaremos en el problema de las vibraciones de una cadena lineal diatómica con una impureza isotópica. Después de introducir este nuevo método y obtener las frecuencias y formas de los modos compararemos nuestros resultados con los obtenidos por otros métodos en problemas semejantes, para finalmente mencionar algunas aplicaciones de estos resultados en cristales reales.

El problema de las vibraciones de una red diatómica finita -- lineal con extremos fijos con interacción a primeros vecinos fue investigado por Mazur, Mc Coll y Potts<sup>4</sup> en 1956 proponiendo una solución aurística. Obtienen que los modos antisimétricos no se alteran al variar la masa de la impureza, solo son alterados los modos simétricos. Al reducir la masa de la impureza se incrementa la frecuencia de los modos localizados y viceversa. De acuerdo a la variación de la masa de la impureza determinan los modos localizados en el caso en que  $N \rightarrow \infty$ . Concretamente obtienen que para  $m' > m > M$  ( $m'$  = masa de la impureza en posición par;  $m$  = masa del átomo en posición par;  $M$  = masa del átomo en posición impar) no existen modos localizados, pero en otros casos se tendrán uno o dos modos localizados, según sea la relación entre las masas  $m$ ,  $m'$  y  $M$ .

En 1957 Hori y Asahi<sup>5</sup> tratan el problema de la cadena diatómica finita con extremos fijos y una impureza en posición impar. Obtienen relaciones de dispersión y ecuaciones de eigenvalores para las frecuencias de los modos localizados utilizando la matriz de transferencia y condiciones a la frontera cíclicas. Demuestran que bajo ciertas relaciones entre las masas se presentan modos localizados que emergen del tope de la rama acústica o bien, de la base de la rama óptica. Obtienen en todos los casos que analizan dos modos localizados.

Nótese que tanto Mazur et al<sup>4</sup> como Hori et al<sup>5</sup> obtienen los modos localizados en una cadena que no considera la superficie ya que, Mazur et al<sup>4</sup> hacen  $N \rightarrow \infty$ , y Hori et al<sup>5</sup> utilizan la condición de Born-Von Karman.

En ese mismo año Bjork<sup>6</sup> trata el caso de una cadena diatómica finita con extremos fijos en la cual la masa y la constante de interacción de la impureza son diferentes a las de los otros átomos de la cadena, utilizando la resolución total de las ecuaciones de movimiento de los átomos via determinantes. En este modelo él encuentra que tal impureza puede generar más de un modo localizado. Calcula el número de estos modos y su localización como función de las relaciones de las masas

y las constantes de interacción. Considera que el acoplamiento entre estados electrónicos de la impureza y las vibraciones de la red se debe principalmente al modo fuertemente localizado cuando este se presenta.

Lucovsky, Brodsky y Burstein<sup>7</sup> en 1970 refinaron el método de Mazur et al<sup>4</sup> de la cadena diatómica lineal e hicieron cálculos que compararon con aproximadamente veinte sólidos diferentes, obteniendo muy buenos resultados cuantitativos para los modos localizados. Estos resultados son mejores en algunos casos - que los cálculos más elaborados en redes tridimensionales.

Bala, Malik y Ghatak<sup>8</sup> en 1972 estudian los modos localizados en un modelo análogo al de Bjork<sup>6</sup> al que le cambian las condiciones de frontera fijas por libres e introducen un potencial diferente para la superficie siguiendo el método de "fuerzas extras". Estudian por un lado el problema de la impureza despreciando los efectos de superficie y, por otro los efectos - de superficie despreciando los efectos de la impureza. Sus resultados coinciden con los obtenidos por autores anteriores. En el caso de la impureza utilizan la constante de fuerza diferente para ajustar sus resultados con los experimentales. - Al introducir H<sup>-</sup> o D<sup>-</sup> en KCl, NaCl y NaBr obtienen resultados para las frecuencias de los modos de impureza en estos halógenos alcalinos que son consistentes con las interacciones del potencial cristalino.

Parte del trabajo que aquí desarrollamos fue presentado en el XX Congreso Nacional de Investigación en Física<sup>9</sup>.

También podemos mencionar que hay una serie de trabajos asociados con el estudio de las vibraciones de la red en cadenas monoatómicas y diatómicas que de alguna manera tienen resultados para las frecuencias de los modos normales de vibración<sup>10, 11, 12, 13</sup>.

Recientemente se ha desarrollado un método más poderoso para tratar los problemas de vibraciones en redes cristalinas principalmente enfocado a resolver problemas con interacciones --

más complejas,<sup>14,15</sup> cuando se toman en cuenta interacciones - a primeros vecinos nuestros resultados coinciden totalmente.

Para resolver nuestro problema hemos obtenido en el capítulo I el aspecto de frecuencias de una cadena diatómica infinita limpia y mostramos las formas de los modos normales de vibración en este caso. En el capítulo II obtenemos las frecuencias de los modos localizados utilizando el método de la matriz de dispersión. Tal método consiste en considerar a la impureza como centro dispersor y proponer soluciones para los desplazamientos de los átomos del tipo de ondas planas a cada lado del centro dispersor. La matriz de dispersión nos da las amplitudes de las ondas salientes en términos de las amplitudes de las ondas entrantes al centro dispersor. Un modo localizado es un estado estacionario. Tal estado se puede obtener con la condición que hace a la matriz de dispersión singular, de aquí se obtiene la ecuación de eigenvalores para las frecuencias de los modos localizados. También obtenemos las condiciones de existencia para estos modos. En el capítulo III analizamos los resultados obtenidos para las frecuencias y formas de los modos localizados y presentamos gráficas para algunos cristales ideales. Comparamos nuestros resultados con los de los autores mencionados haciendo notar la diferencia en las condiciones de frontera y su importancia en los resultados obtenidos, finalmente mencionaremos las comparaciones de este modelo con algunos trabajos experimentales.

C A P I T U L O I



## CADENA DIATÓMICA INFINITA

En este capítulo vamos a resolver el problema de un cristal -- infinito y a obtener el espectro de frecuencias de los modos normales y la forma de éstos, para lo cual propondremos como solución una combinación lineal de ondas planas entrantes y -- salientes para cada tipo de átomos de acuerdo a la técnica de la matriz **S** que necesitaremos para resolver el problema de -- los modos localizados en el siguiente capítulo. Sustituyendo estas soluciones en las ecuaciones de movimiento del problema obtendremos el espectro de frecuencias de los modos normales del cristal infinito y haremos un análisis de él. También -- mostraremos los tipos de modos de este cristal infinito. El modelo que se utilizará es el de una cadena lineal con dos ti-- pos de masas  $m$  y  $M$  alternándose regularmente, donde cada tipo de átomo está unido a su primer vecino por un potencial que -- en primera aproximación obedece la Ley de Hooke. Utilizare-- mos solamente interacciones a primeros vecinos y llamaremos a la constante entre ellos  $K$ . Este modelo se ilustra en la fi-- gura (1).

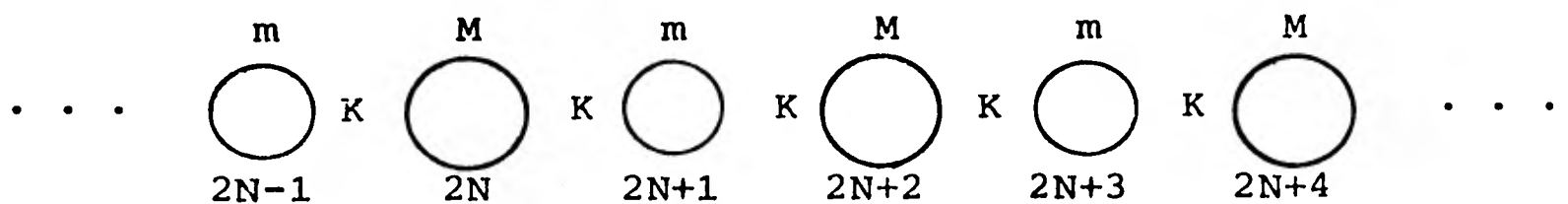


Fig. (1) Cadena diatómica infinita con interacción a primeros vecinos.

En "equilibrio" los átomos están separados por una distancia  $a$ , de manera que cada celda unitaria tendrá una longitud  $2a$ . Designaremos al desplazamiento del átomo  $N$  a partir de su "posición de equilibrio" por  $U_n$ .

La energía potencial del sistema es:

$$1) \quad V = \sum_{-\infty}^{+\infty} K (U_{2N} - U_{2N+1})^2 + K (U_{2N+1} - U_{2N+2})^2$$

Cuya derivada da la fuerza sobre el átomo N-ésimo. Ya que -- las fuerzas entre los átomos obedecen la ley de Hooke a prime ra aproximación, las ecuaciones de movimiento de los átomos -- pueden ser tratadas por los métodos de coordenadas normales -- para aceptar soluciones tipo onda. Las ecuaciones de Newton para los movimientos de cada tipo de átomo, son:

Para el  $2N-1$

$$2.1) \quad m \frac{d^2 U_{2N-1}}{dt^2} = K(U_{2N-2} + U_{2N} - 2U_{2N-1})$$

Para el  $2N$

$$2.2) \quad M \frac{d^2 U_{2N}}{dt^2} = K(U_{2N-1} + U_{2N+1} - 2U_{2N})$$

Para el  $2N+1$

$$2.3) \quad m \frac{d^2 U_{2N+1}}{dt^2} = K(U_{2N} + U_{2N+2} - 2U_{2N+1})$$

Para el  $2N+2$

$$2.4) \quad M \frac{d^2 U_{2N+2}}{dt^2} = K(U_{2N+1} + U_{2N+3} - 2U_{2N+2})$$

Considerando que los átomos del mismo tipo tengan la misma -- amplitud, y átomos de diferente tipo tengan amplitud diferente, proponemos una solución como una combinación lineal de on das del tipo:

$$3.1) \quad U_{2N} = A_2 \exp[-i(wt - 2N\theta)] + B_2 \exp[-i(wt + 2N\theta)]$$

$$3.2) \quad U_{2N+1} = A_1 \exp \{-i [wt - (2N+1) \theta]\} + B_1 \exp \{-i [wt + (2N+1) \theta]\}$$

en donde:

$$\theta = qa$$

q = número de onda reducido

a = parámetro de la red ( a = 1 )

w = frecuencia angular de vibración

Sustituyendo las soluciones en las ecuaciones de movimiento y dividiendo entre  $\exp(-iwt)$ , obtenemos ecuaciones independientes del tiempo.

(3) en (2.1):

$$4) \quad B_1 \exp[-i\theta (2N-1)] (m\omega^2 - 2K) + A_1 \exp[i\theta (2N-1)] (m\omega^2 - 2K) + B_2 2K \cos\theta \exp[-i\theta(2N-1)] + A_2 2K \cos\theta \exp[i\theta(2N-1)] = 0$$

(3) en (2.2):

$$5) \quad B_1 2K \cos\theta \exp(-2iN\theta) + A_1 2K \cos\theta \exp(2iN\theta) + B_2 \exp(-2iN\theta) (M\omega^2 - 2K) + A_2 \exp(2iN\theta) (M\omega^2 - 2K) = 0$$

(3) en (2.3):

$$6) \quad B_1 \exp[-i\theta(2N+1)] (m\omega^2 - 2K) + A_1 \exp[i\theta(2N+1)] (m\omega^2 - 2K) + B_2 2K \cos\theta \exp[-i\theta(2N+1)] + A_2 2K \cos\theta \exp[i\theta(2N+1)] = 0$$

(3) en (2.4):

$$7) \quad B_1 2K \cos\theta \exp[-i\theta(2N+2)] + A_1 2K \cos\theta \exp[i\theta(2N+2)] + B_2 (M\omega^2 - 2K) \exp[-i\theta(2N+2)] + A_2 (M\omega^2 - 2K) \exp[i\theta(2N+2)] = 0$$

Las ecuaciones (4) a (7) forman un sistema homogéneo con solución diferente a la trivial si:

8)

$$\begin{vmatrix}
 \exp[-i\theta(2N-1)](m\omega^2-2K) & \exp[i\theta(2N-1)](m\omega^2-2K) & 2K\cos\theta\exp[-i\theta(2N-1)] & 2K\cos\theta\exp[i\theta(2N-1)] \\
 2K\cos\theta\exp(-2iN\theta) & 2K\cos\theta\exp(2iN\theta) & \exp(-2iN\theta)(M\omega^2-2K) & \exp(2iN\theta)(M\omega^2-2K) \\
 \exp[-i\theta(2N+1)](m\omega^2-2K) & \exp[i\theta(2N+1)](m\omega^2-2K) & 2K\cos\theta\exp[-i\theta(2N+1)] & 2K\cos\theta\exp[i\theta(2N+1)] \\
 2K\cos\theta\exp[-i\theta(2N+2)] & 2K\cos\theta\exp[i\theta(2N+2)] & \exp[-i\theta(2N+2)](M\omega^2-2K) & \exp[i\theta(2N+2)](M\omega^2-2K)
 \end{vmatrix} = 0$$

Cada columna tiene como factor común a  $\exp(2iN\theta)$  o  $\exp(-2iN\theta)$  por lo cual el determinante se reduce a:

$$\begin{vmatrix}
 \exp(i\theta) & \exp(-i\theta) & \exp(i\theta)B & \exp(-i\theta)B \\
 1 & 1 & A & A \\
 \exp(-i\theta) & \exp(i\theta) & \exp(-i\theta)B & \exp(i\theta)B \\
 \exp(-2i\theta) & \exp(2i\theta) & \exp(-2i\theta)A & \exp(2i\theta)A
 \end{vmatrix} = 0$$

Donde

$$A = \frac{(M\omega^2 - 2K)}{2K\cos\theta}$$

$$B = \frac{2K\cos\theta}{(m\omega^2 - 2K)}$$

y resolviendo el determinante, se tiene:

$$2A \cos \theta (4A \sin \theta \sin 2\theta - 4B \sin \theta \sin 2\theta) - 2B \cos \theta (4A \sin \theta \sin 2\theta - 4B \sin \theta \sin 2\theta)$$

de donde  $A - B = 0$

$$\therefore \frac{MW^2 - 2K}{2K \cos \theta} = \frac{2K \cos \theta}{(mW^2 - 2K)}$$

Lo cual nos conduce a la relación de dispersión del cristal in finito:

$$9) \quad mMW^4 - 2K(m+M)W^2 + 4K^2 \sin^2 \theta = 0$$

#### ESPECTRO DE FRECUENCIAS

Ahora se analizará la curva de frecuencias, para lo cual utilizamos la ecuación (9), escribiéndola en la siguiente forma:

$$10) \quad \sin^2 \theta = \frac{1}{4K^2} \left[ 2K(m+M)W^2 - mMW^4 \right]$$

Como estamos analizando los modos normales del cristal infinito sabemos que  $\theta$  deberá ser real, de manera que  $0 \leq \sin^2 \theta \leq 1$ .

Considerando primero la condición de  $0 \leq \sin^2 \theta$ , la ecuación -- (10) nos conduce a:

$$0 \leq W^2$$

$$11) \quad W^2 \leq 2K \left( \frac{1}{M} + \frac{1}{m} \right)$$

Lo cual indica que la frecuencia esta restringida a variar entre cero y un valor máximo:

$$12) \quad W_0 = \sqrt{2K \left( \frac{1}{M} + \frac{1}{m} \right)}$$

Este es un resultado importante, pues si recordamos los modelos de Einstein y de Debye, en ellos se impone una frecuencia máxima, y en nuestro modelo, la frecuencia máxima resulta del análisis de la relación de dispersión, además, tal frecuencia máxima está dada en términos de los parámetros que caracterizan al cristal.

Considerando ahora la condición  $\sin^2 \theta \leq 1$ , se tiene, de ecuación (10):

$$13) \quad 0 \leq \left( W^2 - \frac{2K}{m} \right) \left( W^2 - \frac{2K}{M} \right)$$

y para el caso límite  $\sin^2 \theta = 1$ :

$$0 = \left( W^2 - \frac{2K}{m} \right) \left( W^2 - \frac{2K}{M} \right)$$

con lo cual, la frecuencia puede tomar uno de los dos valores siguientes:

$$W^2 = \frac{2K}{m}$$

o

$$W^2 = \frac{2K}{M}$$

Considerando la ecuación (11), y tomando el límite cuando  $\text{Sen}^2\theta=0$ , se tiene que  $W^2=0$ , o bien  $W_0^2 = 2K\left(\frac{1}{M} + \frac{1}{m}\right)$ ; con lo que podemos asegurar que al menos en los límites, la frecuencia puede tomar uno de dos valores para el mismo número de onda.

Si consideramos que  $M > m$ , tendremos:

$$W_+ = \sqrt{\frac{2K}{m}}$$

14)

$$W_- = \sqrt{\frac{2K}{M}}$$

Ya que  $M > m$ ,  $W_+ > W_-$ , y los signos "mas" y "menos" indican la frecuencia mayor y la menor respectivamente.

Nótese que  $W_0 > W_+ > W_-$ , sin embargo aún no se sabe que sucede con la frecuencia entre los límites que se han obtenido. Para ello analizamos la condición  $\text{Sen}^2\theta < 1$ , de esto se tiene:

$$0 < \left(W^2 - \frac{2K}{M}\right) \left(W^2 - \frac{2K}{m}\right)$$

para que esta desigualdad se cumpla, ambos binomios deben ser positivos o ambos negativos, es decir :

$$W^2 > \frac{2K}{M}$$

$$W^2 < \frac{2K}{M}$$

$$W^2 > \frac{2K}{m}$$

$$W^2 < \frac{2K}{m}$$

Para el primer caso  $\frac{2K}{m} > \frac{2K}{M}$ , ya que  $M > m$  para que ambas desigualdades siempre se cumplan, consideramos  $W^2 > \frac{2K}{m}$ ; en el segundo caso, con un razonamiento similar consideramos  $W^2 < \frac{2K}{M}$ . Con lo cual se completa el análisis, y así podemos asegurar que la frecuencia puede variar en los intervalos:

$$15.1) \quad \sqrt{\frac{2K}{m}} \leq W \leq \sqrt{2K\left(\frac{1}{M} + \frac{1}{m}\right)}$$

$$15.2) \quad 0 \leq W \leq \sqrt{\frac{2K}{M}}$$

Hasta aquí sabemos que la curva de frecuencias está formada por dos ramas, y que, de acuerdo con la ecuación (15) existe una banda prohibida entre ellas, pero aún no sabemos la forma que tiene la curva. Para esto consideraremos el análisis hecho por Brillouin<sup>7</sup>. De la relación de dispersión del cristal infinito, ecuación (9), podemos despejar a  $W^2$ :

$$W^2 = \frac{K}{mM} \left[ (m+M) \pm \sqrt{M^2 + m^2 + 2mM \cos 2\theta} \right]$$

Expresando esta relación en términos de  $W_0^2$ ,  $W_+^2$  y  $W_-^2$ , de acuerdo a las definiciones (12) y (14), se tiene:

$$16) \quad W^2 = \frac{1}{2} \left[ W_0^2 \pm \sqrt{W_0^4 - 4W_+^2 W_-^2 \text{ Sen}^2 \theta} \right]$$

La cual podemos analizar bajo las siguientes condiciones, cuando  $\theta$  tiende a cero y cuando  $\theta$  tiende a  $\frac{\pi}{2}$ .

Si  $\theta$  tiende a cero, aproximamos  $\text{Sen}^2 \theta$  a  $\theta^2$ , sustituyendo en ecuación (16) y despreciando los términos de cuarto orden, se tiene:

$$W_{(+)}^2 = W_0^2 - \theta^2 \left[ \frac{W_+^2 - W_-^2}{W_0^2} \right]$$

17)

$$W_{(-)}^2 = \theta^2 \left[ \frac{W_+^2 - W_-^2}{W_0^2} \right]$$

en este caso, los signos "más" y "menos" que están entre paréntesis, indican el signo utilizado del radical de ecuación (16) respectivamente. Se ve claramente de las ecuaciones (17), que cuando  $\theta = 0$ ,  $W_{(+)} = W_0$  y  $W_{(-)} = 0$ , y a partir de estos valores  $W_{(+)}$  decrece parabólicamente, mientras que  $W_{(-)}$  crece parabólicamente conforme  $\theta$  aumenta. Cuando  $\theta$  tiende a  $\frac{\pi}{2}$ , podemos hacer el análisis sustituyendo  $\theta$  por  $\frac{\pi}{2} - \delta$ , y aproximando  $\text{Sen}^2 \theta$  a  $(1 - \delta^2)$ , se tiene:

$$W_{(+)}^2 = W_+^2 + \delta^2 \left[ \frac{W_+^2 - W_-^2}{W_+^2 - W_-^2} \right]$$

18)

$$W_{(-)}^2 = W_-^2 - \delta^2 \left[ \frac{W_+^2 - W_-^2}{W_+^2 - W_-^2} \right]$$

Obsérvese que  $W_{(+)}^2$  crece parabólicamente y  $W_{(-)}^2$  decrece parabólicamente conforme  $\delta$  aumenta, y los límites son  $W_+^2$  y  $W_-^2$  respectivamente. Ya que la función que aparece en ecuación (16) es tal que no tiene discontinuidades cuando el argumenteo es real, la forma de la curva debe ser parabólica y creciente desde cero a hasta  $W_-$ , y parabólica decreciente desde  $W_0$  hasta  $W_+$  conforme  $\theta$  aumenta. Después de este análisis podemos identificar a  $W_{(+)}$  con la rama superior, y a  $W_{(-)}$  con la rama inferior. La gráfica de  $W(\theta)$  está representada en la figura (2). Hay dos frecuencias angulares  $W_{(+)}$  y  $W_{(-)}$  correspondientes a un solo valor del número



de onda, las cuales se repiten cada  $\pi$ , lo cual era de esperar se ya que la celda unitaria tiene una longitud de  $2a$  y la primera zona de Brillouin va de  $-\frac{\pi}{2}$  a  $\frac{\pi}{2}$ .

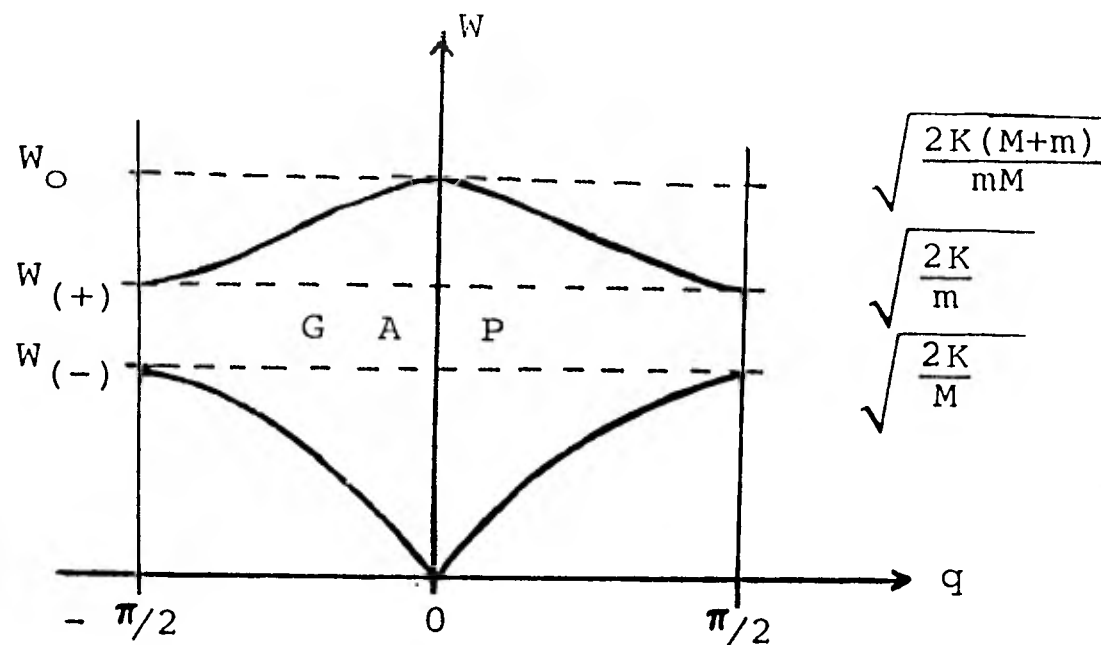
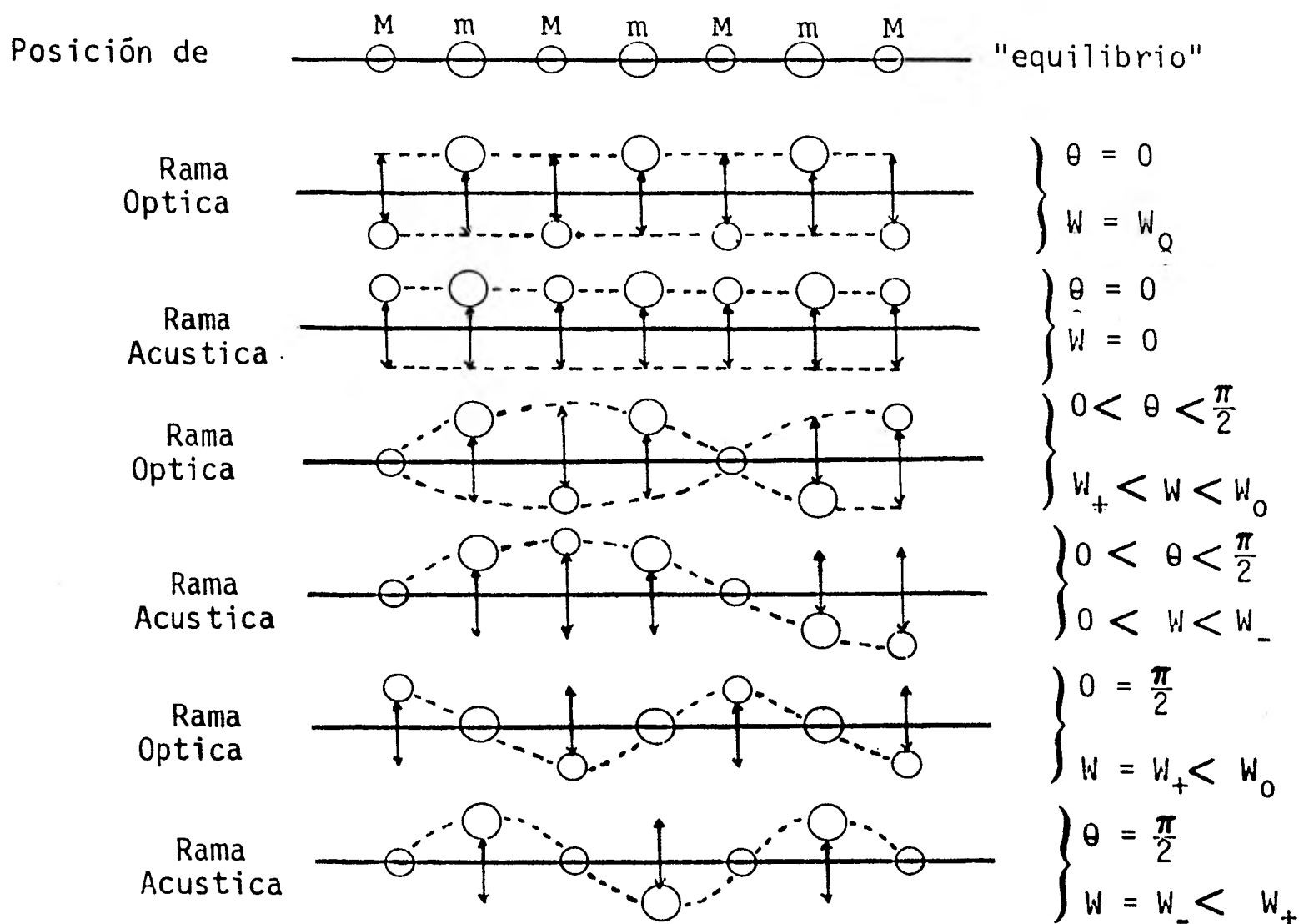


Fig. (2) Curva de frecuencias del cristal diatómico con interacción a primeros vecinos.

La frecuencia de la rama inferior tiene las características típicas de las ondas sonoras y para  $\theta$  pequeñas la estructura detallada de la cadena no tiene efectos sobre el modo. Por esta razón la rama inferior se denomina "rama acústica". En la rama superior los dos átomos de la celda se mueven en direcciones opuestas. Si los dos átomos tuviesen cargas opuestas como en un cristal iónico simple, tal modo crearía una serie de dipolos oscilantes. Si este estuviera fuertemente acoplado a un campo eléctrico podría ser puesto en movimiento por un campo de la misma frecuencia. Para la mayor parte de los sólidos, esta frecuencia es similar a la de la luz infrarroja y por esta razón la rama superior se denomina "rama óptica". Además existe un intervalo de frecuencias entre  $W_{(+)}$  y  $W_{(-)}$ , en el cual los átomos no vibran a esas frecuencias, a este intervalo se le llama "banda prohibida".

Cuando  $M \rightarrow m$ , este espectro se reduce al de una cadena monoatómica. El gap en  $\theta = \frac{\pi}{2}$  desaparece y la rama superior se replega para cubrir la región de  $-\frac{\pi}{2}$  a  $\frac{\pi}{2}$ .

Mostraremos ahora la forma de los modos normales de vibración para algunos casos particulares, para esto consideraremos los transversales, ya que con estos se comprenderá claramente el movimiento de los átomos, sin embargo, recuérdese que los modos son longitudinales.



(3) Forma de los modos normales de vibración de la cadena diatómica.

de estos modos fue obtenida por primera vez por Brillouin<sup>16</sup> a través de la descomposición de amplitudes de las ondas.

En este capítulo hemos encontrado las frecuencias de los modos normales del cristal infinito y también hemos mostrado las formas utilizando como solución a las ecuaciones de movimiento de los átomos una combinación lineal de ondas planas. Los resultados más importantes son, que el espectro de frecuencias consiste de dos ramas, la acústica y la óptica y una región entre ellas, llamada región de frecuencias prohibidas. También la región por arriba de la rama óptica es prohibida para estos modos del cristal infinito. En el caso de las formas para los modos de tipo óptico los movimientos de los átomos están fuera de fase por  $180^\circ$  y en el caso de la rama acústica los movimientos atómicos están en fase.

C A P I T U L O     I I

## MODOS LOCALIZADOS

Este capítulo es el más importante de este trabajo, ya que -- aquí se calculan las frecuencias y las condiciones de existencia de los modos localizados con ayuda de la técnica de la matriz de dispersión.

Para esto consideramos una red diatómica infinita compuesta -- de átomos de masas  $m$  y  $M$  alternándose regularmente, reemplazamos el átomo central de masa  $M$  por uno de masa  $M'$ . Debido a -- que se considera una impureza isotópica la constante de interacción  $K$  no sufre cambios. La interacción también será a primeros vecinos, este modelo está representado en la Fig.4.

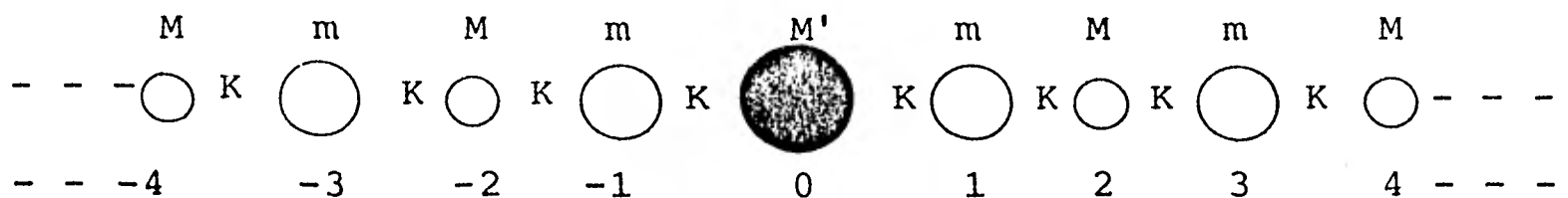


Fig. (4) Cadena diatómica infinita con impureza isotópica.

Considerando el potencial y las fuerzas sobre los átomos como en el caso de la cadena diatómica sin impureza, las ecuaciones de movimiento son:

Para el átomo  $N = -1$

$$19) \quad m \frac{d^2 U_{-1}}{dt^2} = K (U_{-2} + U_0 - 2U_{-1})$$

Para el átomo  $N = 0$

$$M' \frac{d^2 U_0}{dt^2} = K (U_{-1} + U_1 - 2U_0)$$

Para el átomo  $N=1$

$$21) \quad m \frac{d^2 U_1}{dt^2} = K (U_0 + U_2 - 2U_1)$$

Las ecuaciones (19) a (21) son las condiciones de frontera en nuestro problema.

Como la impureza es un centro dispersor se propone la solución como una combinación lineal de ondas del tipo:

$$\left. \begin{aligned} 22.1) \quad U_N &= A_1 \exp[-i(Wt - N\theta)] + B_1 \exp[-i(Wt + N\theta)] , N \text{ impar} \\ 22.2) \quad U_N &= A_2 \exp[-i(Wt - N\theta)] + B_2 \exp[-i(Wt + N\theta)] , N \text{ par} \\ 22.3) \quad U_N &= A_3 \exp[-i(Wt + N\theta)] + B_3 \exp[-i(Wt - N\theta)] , N \text{ impar} \\ 22.4) \quad U_N &= A_4 \exp[-i(Wt + N\theta)] + B_4 \exp[-i(Wt - N\theta)] , N \text{ par} \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} N \leq 0 \\ N \geq 0 \end{array}$$

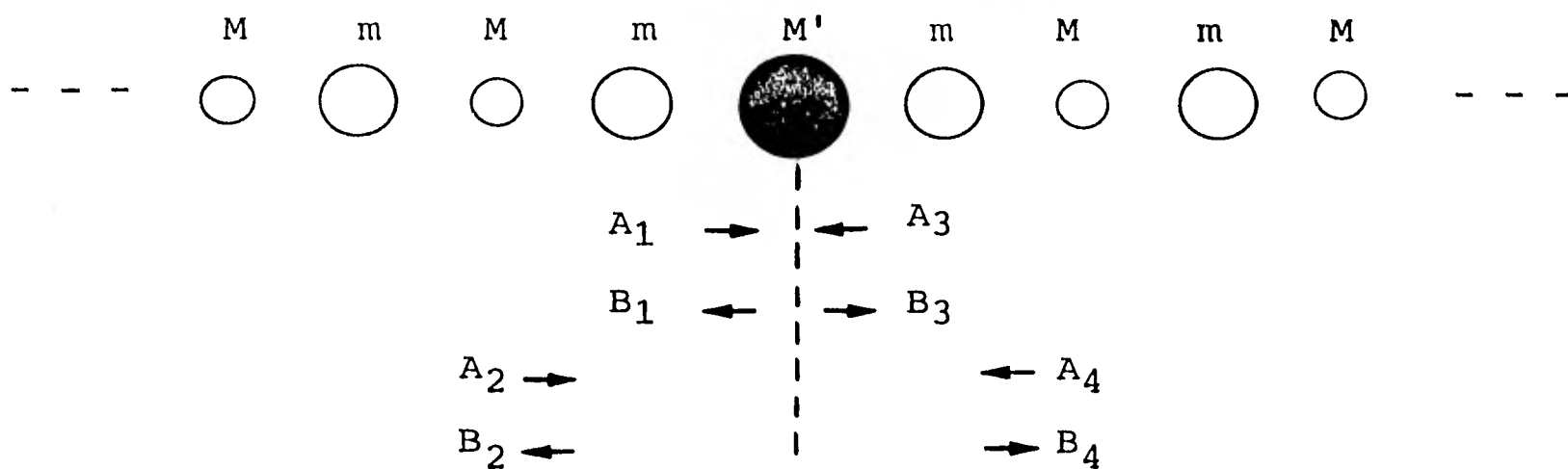


Fig. 5 Cadena diatómica infinita con impureza isotópica en posición par.

La condición de continuidad de la solución en  $N=0$ , es:

$$23) \quad A_2 + B_2 = A_4 + B_4$$

Sustituyendo la solución en las ecuaciones de movimiento, - - ecuaciones (19), (20) y (21):

para el átomo N= -1

$$24) B_1 \exp(i\theta)(mW^2 - 2K) + B_2 2K \exp(i\theta) \cos\theta = -A_1 \exp(-i\theta)(mW^2 - 2K) - A_2 2K \exp(-i\theta) \cos\theta$$

para el átomo N= 0

$$25) B_1 K \exp(i\theta) + B_3 K \exp(i\theta) + B_4 (M'W^2 - 2K) = -A_1 K \exp(-i\theta) - A_3 K \exp(-i\theta) - A_4 (M'W^2 - 2K)$$

para el átomo N= 1

$$26) B_3 \exp(i\theta)(mW^2 - 2K) + B_4 2K \exp(i\theta) \cos\theta = -A_3 \exp(-i\theta)(mW^2 - 2K) - A_4 2K \exp(-i\theta) \cos\theta$$

Debido a que la solución de nuestro problema esta basada en el método de la matriz de dispersión, debemos expresar las amplitudes de las ondas salientes del centro dispersor en terminos de las amplitudes de las ondas entrantes al centro dispersor, es decir, las B's en términos de las A's. Para lo cual utilizamos las ecuaciones (23) a (26) , y tenemos:

$$27) B_1 = - \left[ 8K^3 \exp(2i\theta) \cos^3\theta \right] A_4 + 0A_3 - \left[ 4K^2 \exp(i\theta) \cos^2\theta \left[ mM' - 2K^2 \exp(i\theta) \cos\theta \right] \right] A_2 - m \left[ mM' - 4K^2 \exp(i\theta) \cos\theta \right] A_1$$

$$28) B_2 = \left[ 4K^2 \exp(i\theta) \cos^2\theta \right] A_4 + 0A_3 + \left[ 4K^2 \exp(i\theta) \cos^2\theta - \exp(i\theta) mM' \right] A_2 + 0A_1$$

$$29) B_3 = - \left\{ 4K \exp(i\theta) \cos^2\theta \left[ mM' - 2K^2 \exp(i\theta) \cos\theta \right] \right\} A_4 - m \left[ mM' - 4K^2 \exp(i\theta) \cos\theta \right] A_3 - \left[ 8K^3 \exp(2i\theta) \cos^3\theta \right] A_2 + 0A_1$$

$$30) B_4 = \left[ 4K^2 \exp(i\theta) \cos^2\theta - \exp(i\theta) mM' \right] A_4 + 0A_3 + \left[ 4K^2 \exp(i\theta) \cos^2\theta \right] A_2 + 0A_1$$

Podemos expresar las ecuaciones (27) a (30) en forma matricial:

$$31) \quad \begin{bmatrix} B_1 \\ B_2 \\ B_3 \\ B_4 \end{bmatrix} = \mathbf{S} \begin{bmatrix} A_4 \\ A_3 \\ A_2 \\ A_1 \end{bmatrix}$$

en donde  $\mathbf{S}$  es la matriz de dispersión, la cual tiene la forma:

$$32) \quad \mathbf{S} = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{bmatrix}$$

$$\text{con } S_{11} = \begin{bmatrix} C & 0 \\ F & 0 \end{bmatrix} \quad S_{12} = \begin{bmatrix} D & E \\ G & 0 \end{bmatrix} \quad S_{21} = \begin{bmatrix} D & E \\ G & 0 \end{bmatrix} \quad S_{22} = \begin{bmatrix} C & 0 \\ F & 0 \end{bmatrix}$$

en donde:

$$C = -[8K^3 \exp(2i\theta) \cos^3 \theta] / (mW^2 - 2K)(M'W^2 - 2K) - 4K^2 \exp(i\theta) \cos \theta$$

$$D = -4K^2 \exp(i\theta) \cos^2 \theta [mM' - 2K^2 \exp(i\theta) \cos \theta] / (mW^2 - 2K)(M'W^2 - 2K) - 4K^2 \exp(i\theta) \cos \theta$$

$$E = -m[mM' - 4K^2 \exp(i\theta) \cos \theta] / (mW^2 - 2K)(M'W^2 - 2K) - 4K^2 \exp(i\theta) \cos \theta$$

$$F = 4K^2 \exp(i\theta) \cos^2 \theta / (mW^2 - 2K)(M'W^2 - 2K) - 4K^2 \exp(i\theta) \cos \theta$$

$$G = [4K^2 \exp(i\theta) \cos^2 \theta - \exp(i\theta) mM'] / (mW^2 - 2K)(M'W^2 - 2K) - 4K^2 \exp(i\theta) \cos \theta$$

Debido a que la simetría de una cadena diatómica como la nuestra se presenta considerando la celda unitaria, y esta compuesta por dos tipos de átomos, tenemos que cada elemento de  $\mathbf{S}$  es una matriz de  $2 \times 2$ , lo cual concuerda con el análisis del determinante utilizado por Bjork<sup>6</sup> y Achar<sup>3</sup> et al<sup>3</sup> en sus respectivos trabajos.

Considerando que todos los elementos de  $\mathbf{S}$  tienen un denominador común, expresamos la ecuación (31) en la forma:



$$33) \quad \begin{bmatrix} B_1 \\ B_2 \\ B_3 \\ B_4 \end{bmatrix} = \frac{1}{R} \begin{bmatrix} S'_{11} & S'_{12} \\ S'_{21} & S'_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_4 \\ A_3 \\ A_2 \\ A_1 \end{bmatrix}$$

en donde:

$$34) \quad R = (mW^2 - 2K)(M'W^2 - 2K) - 4K^2 \exp(i\theta) \cos\theta$$

Un modo localizado alrededor de la impureza se puede caracterizar como un estado estacionario sin ondas incidentes. Tal estado se puede obtener con la condición de que cada elemento de  $\mathbf{S}$  se haga infinito, es decir,  $\mathbf{S} = \infty$ . Analizando ecuación (32) vemos que esto es imposible, ya que hay elementos que no serán infinitos; por tanto reemplazamos la condición  $\mathbf{S} = \infty$ , por:

$$35) \quad R = 0$$

La ecuación (35) es útil en tanto que se quiera obtener solamente los modos localizados.

La ecuación (35) queda expresada explícitamente por:

$$36) \quad mM'W^4 - 2K(m+M')W^2 + 4K^2 [1 - \exp(i\theta) \cos\theta] = 0$$

La ecuación (36) es la ecuación de eigenvalores para las frecuencias de los modos localizados.

Para obtener las frecuencias de los modos localizados utilizaremos la ecuación de frecuencias del cristal infinito limpio, de manera que obtenemos:

de (9):

$$W^4 = [2K(m+M)W^2 - 4K^2 \text{Sen}^2 \theta] \frac{1}{mM}$$

sustituyendo en (36):

$$37) \quad \frac{mW^2}{K} (1 - \epsilon') + \epsilon' [1 - \exp(2i\theta)] - 1 + \frac{1}{2} [\exp(2i\theta) + \exp(-2i\theta)] = 0$$

$$\text{con } \epsilon' = \frac{M}{M'}$$

Para obtener los modos localizados  $\theta$  debe ser compleja

séa  $\theta = \xi + i\mu$ ,  $\xi$  y  $\mu > 0$ ,  $\xi$  y  $\mu$  reales

Analizando el comportamiento de las exponenciales:

$$\exp(2i\theta) = \exp[2i(\xi + i\mu)] = \exp(2i\xi) \exp(-2\mu)$$

$$\exp(-2i\theta) = \exp[-2i(\xi + i\mu)] = \exp(-2i\xi) \exp(2\mu)$$

Si  $\mu < 0$ ,  $\exp(\pm 2i\mu) \rightarrow \pm \infty$  cuando  $\mu \rightarrow \mp \infty$

por tanto,  $\mu > 0$  para que la onda no diverga.

Con  $\theta = \xi + i\mu$ , la ecuación (37) toma la forma:

$$38) \quad (1 - \epsilon') \left( \frac{mW^2}{K} - 1 \right) - (\cos 2\xi + i \text{Sen} 2\xi) \exp(-2\mu) \left( \epsilon' - \frac{1}{2} \right) + \\ + \frac{1}{2} (\cos 2\xi - i \text{Sen} 2\xi) \exp(2\mu) = 0$$

Ya que  $W$  debe ser real por estar asociada con la energía del cristal,

igualamos la parte imaginaria de la ecuación (38) a cero:

$$-i \text{Sen} 2\xi \left[ \frac{1}{2} \exp(2\mu) + \left( \epsilon' - \frac{1}{2} \right) \exp(-2\mu) \right] = 0$$

tal expresión es cero si:

$$\text{Sen} 2\xi = 0, \text{ es decir, } 2\xi = n\pi \therefore \xi = \frac{n\pi}{2}, n = 0, 1, 2, \dots$$

lo que conduce a:

$$\cos 2\xi = \cos n\pi = (-1)^n$$

Considerando la parte real de la ecuación (38):

$$(1 - \epsilon') \left( \frac{mW^2}{K} - 1 \right) - \left( \epsilon' - \frac{1}{2} \right) \exp(-2\mu) \cos 2\xi + \frac{1}{2} \exp(2\mu) \cos 2\xi = 0$$

sustituyendo el valor de  $\cos^2 \xi$  :

$$39) \quad W^2 = \frac{K}{(1 - \epsilon')^m} \left[ \frac{1}{X} \left( \epsilon' - \frac{1}{2} \right) (-1)^n - \frac{X}{2} (-1)^n + (1 - \epsilon') \right]$$

$$\text{con } X = \exp(2\mu)$$

Analizando la ecuación (39) vemos que se presentan dos casos, n par y n impar.

Para n impar, se tiene:

$$40) \quad W^2 = \frac{K}{(1 - \epsilon')^m} \left( 1 - \epsilon' \right) + \frac{X}{2} + \frac{1}{X} \left( \frac{1}{2} - \epsilon' \right)$$

Con el fin de obtener una ecuación que nos dé los valores de  $\mu$  para los modos localizados, utilizamos la ecuación de frecuencias del cristal infinito, ecuación (9), y la ecuación (40) para eliminar a W, obteniendo la siguiente ecuación:

$$41) \quad \frac{\epsilon}{4} X^4 = \epsilon' (\epsilon' - 1) X^3 - \left[ \epsilon \left( \epsilon'^2 - \epsilon' + \frac{1}{2} \right) \right] X^2 + \epsilon' (1 - \epsilon') X + \epsilon \left( \frac{1}{2} - \epsilon' \right)^2 = 0$$

$$\text{donde } \epsilon = \frac{M}{m}$$

La ecuación (41) tiene como primeras raíces a  $\pm 1$ ,

Si  $X = 1$ ,  $\exp(2\mu) = 1$  con lo cual  $\mu = 0$ , pero  $\mu > 0$  así que  $X = 1$  carece de sentido físico.

Si  $X = -1$ ,  $\exp(2\mu) = -1$  con lo cual  $\mu$  sería imaginario, y como  $\mu$  debe ser real y positivo la raíz  $X = -1$  también carece de sentido físico.

De lo anterior se tienen la siguiente condición:

$$42) \quad X > 1 \text{ para que } \mu > 0$$

Por tanto la ecuación (41) se reduce a la expresión.

$$43) \quad X^2 + 4 \epsilon'' (\epsilon' - 1) X - 4 \left( \epsilon' - \frac{1}{2} \right)^2 = 0$$

$$\text{en donde } \epsilon'' = \frac{\epsilon'}{\epsilon} = \frac{m}{M}$$

Esta ecuación nos da los valores de  $\mu$  para los modos localizados con n impar.

Ahora obtendremos las condiciones de existencia para los modos localizados utilizando la condición obtenida en ecuación (42) y la ecuación (43):

$$X = -2\varepsilon''(\varepsilon' - 1) \pm 2 \left[ \varepsilon''^2 (\varepsilon' - 1)^2 + (\varepsilon' - \frac{1}{2})^2 \right]^{1/2} > 1$$

la solución de esta desigualdad presenta dos casos:

$$a) \quad \left[ \varepsilon''^2 (\varepsilon' - 1)^2 + (\varepsilon' - \frac{1}{2})^2 \right]^{1/2} > \frac{1}{2} + \varepsilon''(\varepsilon' - 1)$$

el cual se reduce a:

$$44) \quad \varepsilon'(\varepsilon' - 1) > \varepsilon''(\varepsilon' - 1)$$

$$i) \text{ Si } \varepsilon' < 1 \Rightarrow \begin{cases} M' < M \\ \varepsilon' < \varepsilon'' \Rightarrow M < m \end{cases} \begin{cases} M' > m > M \\ m > M' > M \end{cases}$$

$$ii) \text{ Si } \varepsilon' > 1 \Rightarrow \begin{cases} M > M' \\ \varepsilon' > \varepsilon'' \Rightarrow M > m \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} M > M' > m \\ M > m > M' \end{cases}$$

El otro caso es:

$$b) \quad \left[ \varepsilon''^2 (\varepsilon' - 1)^2 + (\varepsilon' - \frac{1}{2})^2 \right]^{1/2} < \frac{1}{2} + \varepsilon''(\varepsilon' - 1)$$

el cual se reduce a:

$$45) \quad \varepsilon'(\varepsilon' - 1) < \varepsilon''(\varepsilon' - 1)$$

$$i) \text{ Si } \varepsilon' < 1 \Rightarrow \begin{cases} M' > M \\ \varepsilon' > \varepsilon'' \Rightarrow M > m \end{cases} \Rightarrow \{ M' > M > m$$

$$ii) \text{ Si } \varepsilon' > 1 \Rightarrow \begin{cases} M > M' \\ \varepsilon' < \varepsilon'' \Rightarrow M < m \end{cases} \Rightarrow \{ m > M > M'$$

Las condiciones (b.i) y (b.ii) de ecuación (45) nos conducen a soluciones divergentes, es decir, la frecuencia de los átomos es mayor -- conforme la posición de estos está más alejada del átomo impureza, lo cual contradice a la teoría dada anteriormente.

Por tanto, para  $n$  impar, las condiciones para la existencia de modos localizados son:

$$M > M > M' \text{ (Graf. 6)}; M > M' > m \text{ (Graf. 7)}; M > M' > M \text{ (Graf. 9)}; M' > m > M \text{ (Graf. 10)}$$

La frecuencia para estos modos localizados esta dada por ecuación(40).

Considerando  $n$  par:

de ecuación (39) se tiene:

$$46) \quad \omega^2 = \frac{K}{(1-\epsilon')m} \left[ (1-\epsilon') + \frac{1}{X} \left( \epsilon' - \frac{1}{2} \right) - \frac{X}{2} \right]$$

procediendo análogamente al caso  $n$  impar, con las ecuaciones (46) y (9), se tiene:

$$47) \quad \frac{\epsilon}{4} X^4 + \epsilon'(1-\epsilon')X^3 - \epsilon \left( \epsilon'^2 - \epsilon' + \frac{1}{2} \right) X^2 - \epsilon'(1-\epsilon')X + \epsilon \left( \epsilon' - \frac{1}{2} \right)^2 = 0$$

Esta ecuación tambien tiene como raices a  $\pm 1$ , las cuales carecen de significado fisico, así, la ecuación (47) se reduce a:

$$48) \quad X^2 - 4\epsilon''(\epsilon'-1)X - 4\left(\epsilon' - \frac{1}{2}\right)^2 = 0$$

Esta ecuación nos da los valores de  $\mu$  para los modos localizados con  $n$  par. Considerando la condición  $X > 1$  y despejando  $X$  de ecuación (48) - tenemos:

$$X = 2\epsilon''(\epsilon'-1) \pm 2 \left[ \epsilon''^2(\epsilon'-1)^2 + \left(\epsilon' - \frac{1}{2}\right)^2 \right]^{1/2} > 1$$

cuya solución tambien presenta dos casos:

$$a) \quad \pm \left[ \epsilon''^2(\epsilon'-1)^2 + \left(\epsilon' - \frac{1}{2}\right)^2 \right]^{1/2} > \frac{1}{2} - \epsilon''(\epsilon'-1)$$

el cual se reduce a:

$$49) \quad (\epsilon' + \epsilon'')(\epsilon' - 1) > 0$$

$$i) \text{ Si } \epsilon' < 1 \Rightarrow \begin{cases} M' > M \\ (\epsilon' + \epsilon'') < 0 \Rightarrow \text{no existe modo localizado} \end{cases}$$

$$ii) \text{ Si } \epsilon' > 1 \Rightarrow \begin{cases} M > M' \\ (\epsilon' + \epsilon'') > 0 \Rightarrow \begin{matrix} M > m > M' \\ M > M' > m \\ m > M > M' \end{matrix} \end{cases}$$

el otro caso es:

$$b) \pm \left[ \epsilon''^2 (\epsilon' - 1)^2 + (\epsilon' - \frac{1}{2})^2 \right]^{1/2} < \frac{1}{2} - \epsilon'' \quad (\epsilon' - 1)$$

el cual se reduce a:

$$50) \quad (\epsilon' + \epsilon'') (\epsilon' - 1) < 0$$

$$i) \text{ Si } \epsilon' < 1 \Rightarrow \begin{cases} M' > M \\ (\epsilon' + \epsilon'') > 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} M' > m > M \\ M' > M > m \\ m > M' > M \end{cases}$$

$$ii) \text{ Si } \epsilon' > 1 \Rightarrow \begin{cases} M > M' \\ (\epsilon' + \epsilon'') < 0 \end{cases} \Rightarrow \text{no existe modo localizado}$$

Las condiciones (b.i) de ecuación (50) también nos conducen a soluciones divergentes, y por el razonamiento anterior se eliminan.

Así las condiciones de existencia para modos localizados con  $n$  par son:

$$M > m > M' \text{ (Graf.6) ; } M > M' > m \text{ (Graf.7) ; } m > M > M' \text{ (Graf.8)}$$

La frecuencia para estos modos localizados está dada por la ecuación (46).

En este capítulo hemos obtenido la ecuación de eigenvalores para las frecuencias de los modos localizados con la técnica de la matriz de dispersión, así como las condiciones de existencia para dichos modos. En el siguiente capítulo mostraremos gráficas para las frecuencias y formas para modos localizados en algunos casos particulares.

C A P I T U L O    I I I

## RESULTADOS Y CONCLUSIONES

En este capítulo mostramos el análisis de las frecuencias para los modos localizados con ayuda de las condiciones para su existencia que obtuvimos antes y también presentamos las formas para los máximos desplazamientos de los átomos en las diferentes posiciones del cristal. En la literatura conocida - salvo el caso de Wallis<sup>17</sup> no se presentan las formas de los modos localizados, pero como nosotros consideramos importante su análisis para la mejor comprensión de los modos normales de las redes cristalinas los presentaremos aquí en algunos casos particulares. Comenzaremos con la obtención de las frecuencias.

Se han considerado seis casos en forma general, definidos por las siguientes relaciones entre las masas que forman la cadena y la masa de la impureza:

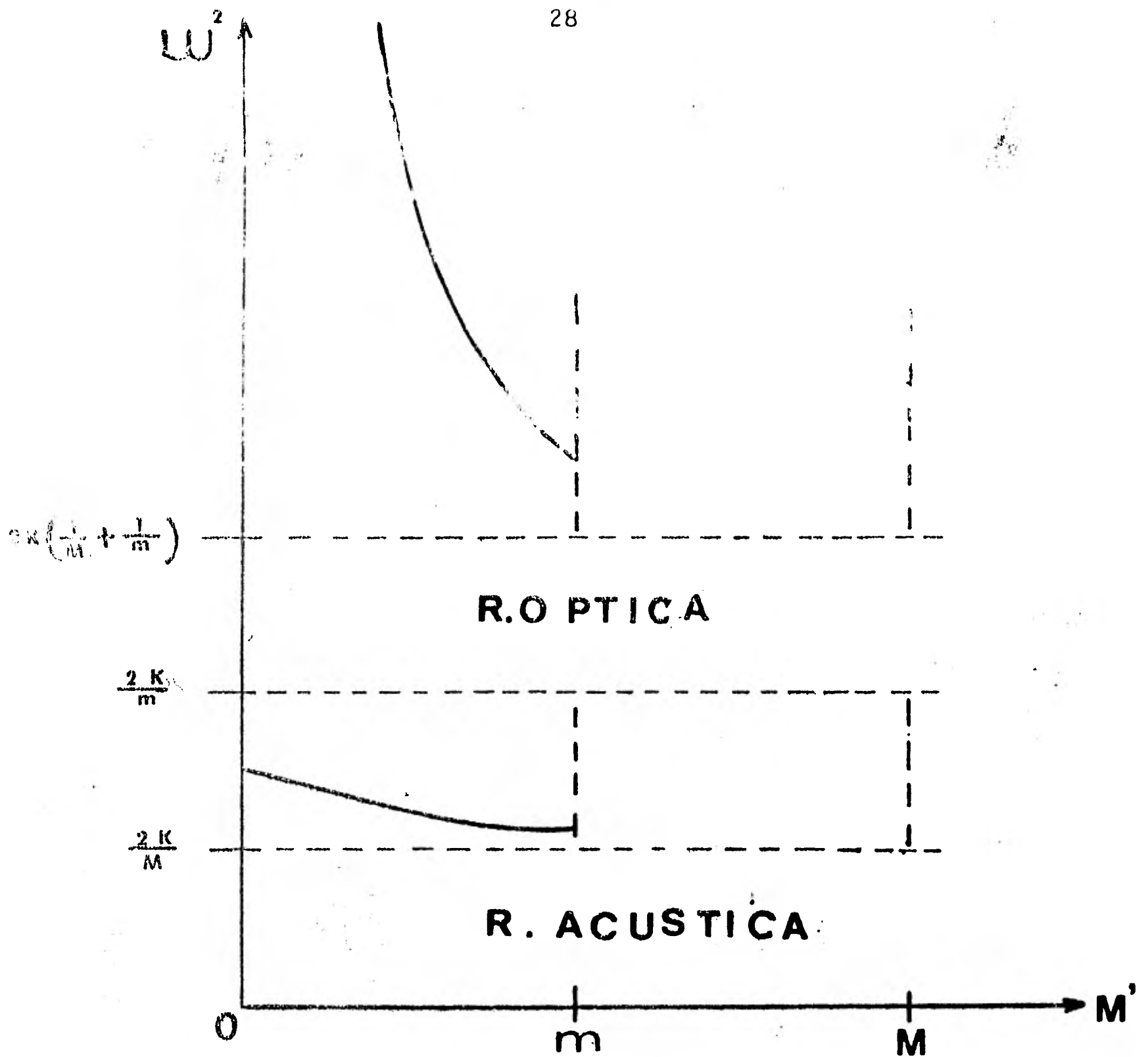
- a)  $M' > M > m$
- b)  $M > m > M'$
- c)  $M > M' > m$
- d)  $m > M > M'$
- e)  $m > M' > M$
- f)  $M' > m > M$

Los casos (a), (b) y (c) representan una cadena en la cual - los átomos en posición par (M) tienen mayor masa que aquellos que están en posición impar (m). Los casos (d), (e) y (f) representan una cadena cuya relación de masas es contraria a la anterior. Recuérdese que la impureza guarda una posición par en ambos casos.

Para el caso (a) donde la masa de la impureza es mayor que la del átomo que sustituye y, ésta a su vez es mayor que la del átomo en posición impar, no existen modos localizados. Para el caso (b) donde la masa en posición par es mayor que la ma-



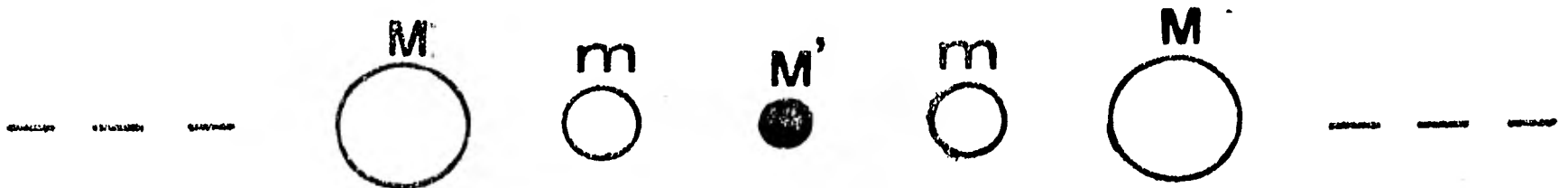
sa en posición impar y, la masa de la impureza es menor que -  
ambas, se tienen dos modos localizados, uno en el gap y otro  
arriba de la rama óptica (gráfica 6). Para el caso (c) donde  
la masa en posición par es mayor que la masa de la impureza -  
y, ésta mayor que la del átomo en posición impar, se obtienen  
también dos modos localizados, uno en el gap y otro arriba de  
la rama óptica (gráfica 7). El caso (d) es análogo al (b) so-  
lo que aquí la masa en posición impar es mayor que la del áto-  
mo en posición par y, la masa de la impureza menor que ambas,  
en este caso se obtiene un modo localizado por arriba de la -  
rama óptica (gráfica 8). En el caso (e) la masa en posición  
impar es mayor que la masa de la impureza y, la masa en posi-  
ción par es menor que ambas, aquí también solo se obtiene un  
modo localizado, con la diferencia del caso anterior que aquí  
se localiza en el gap (gráfica 9). En el caso (f) la masa de  
la impureza es mayor que la masa en posición impar y, esta a  
su vez mayor que la masa en posición par, se obtiene como en  
el último caso un modo localizado en el gap (gráfica 10).

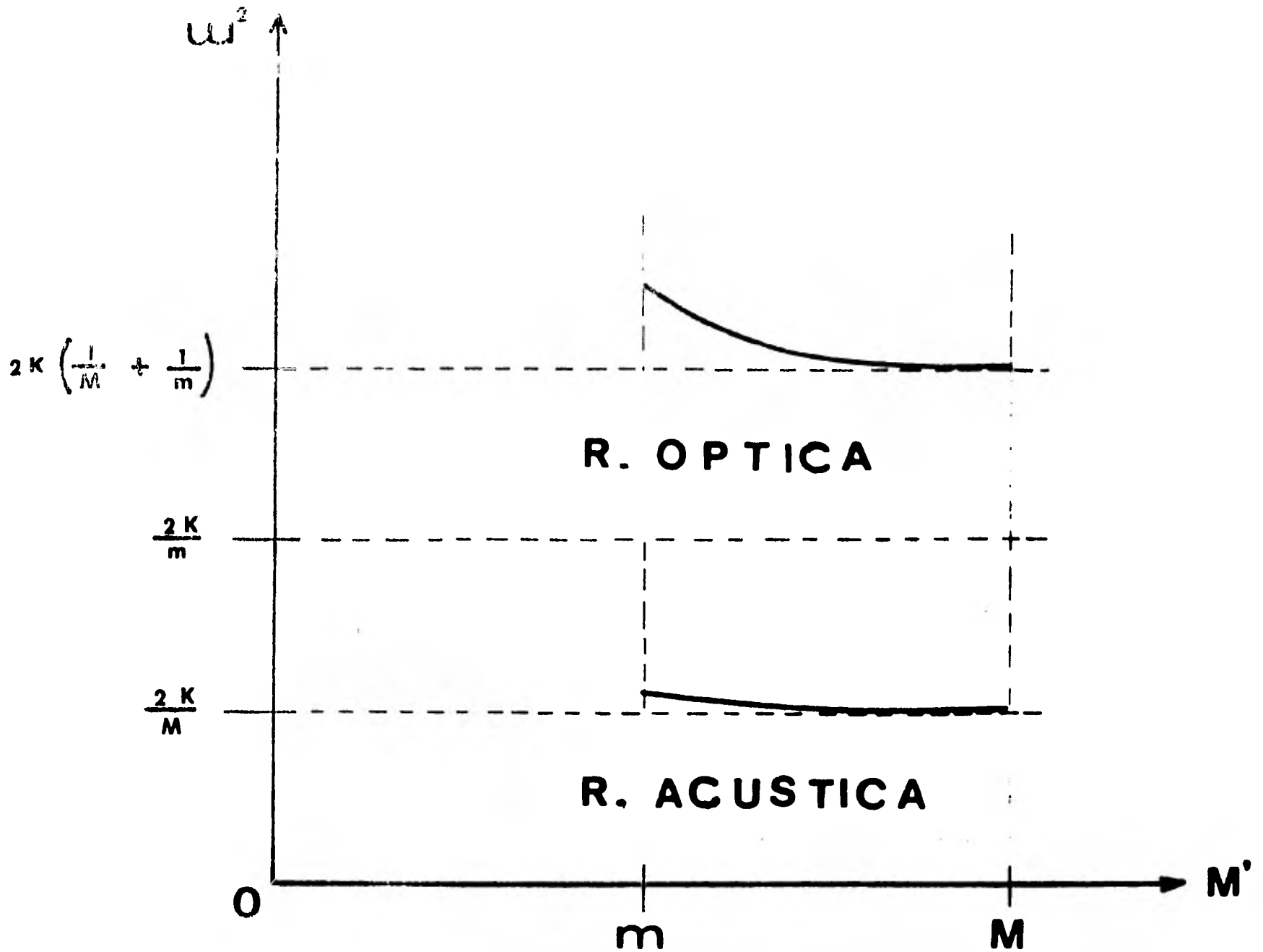


Gráfica 6.- Variación de la frecuencia de los modos localizados en función de la masa del átomo - impureza para el caso:

$$M > m$$

$$M > m > M'$$

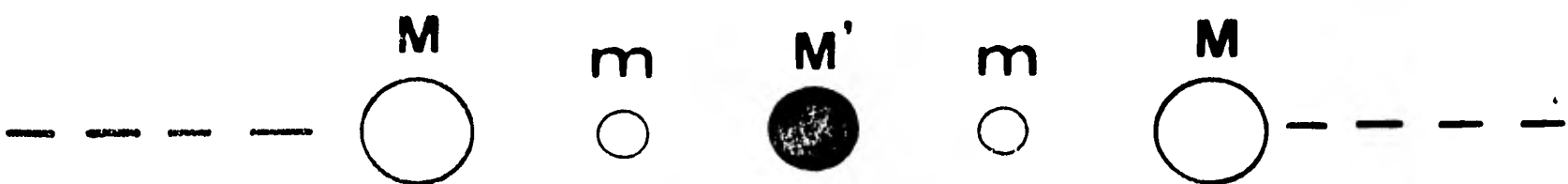


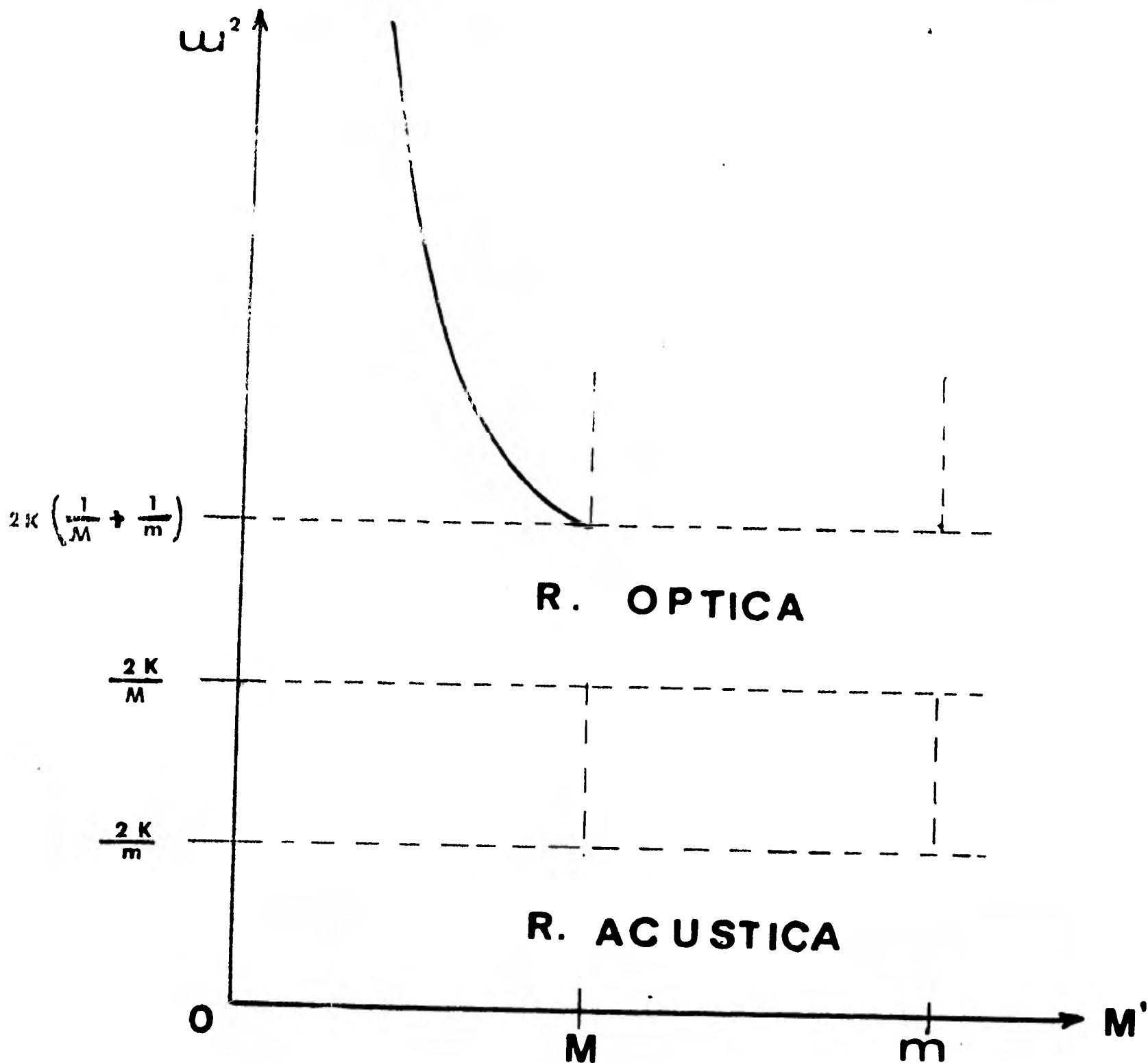


Gráfica 7.- Variación de la frecuencia de los modos localizados en función de la masa del átomo - impureza para el caso:

$$M > m$$

$$M > M' > m$$

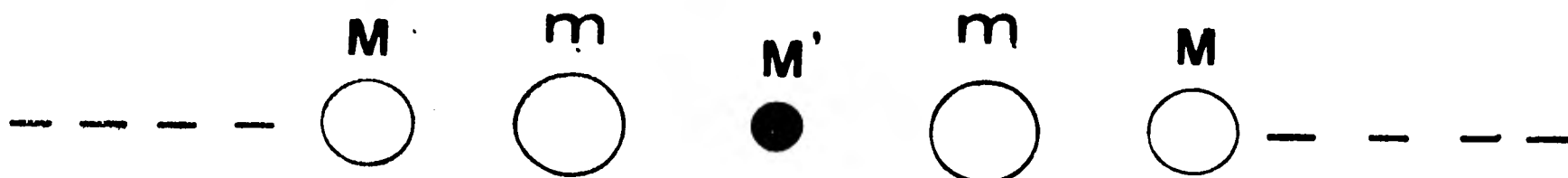


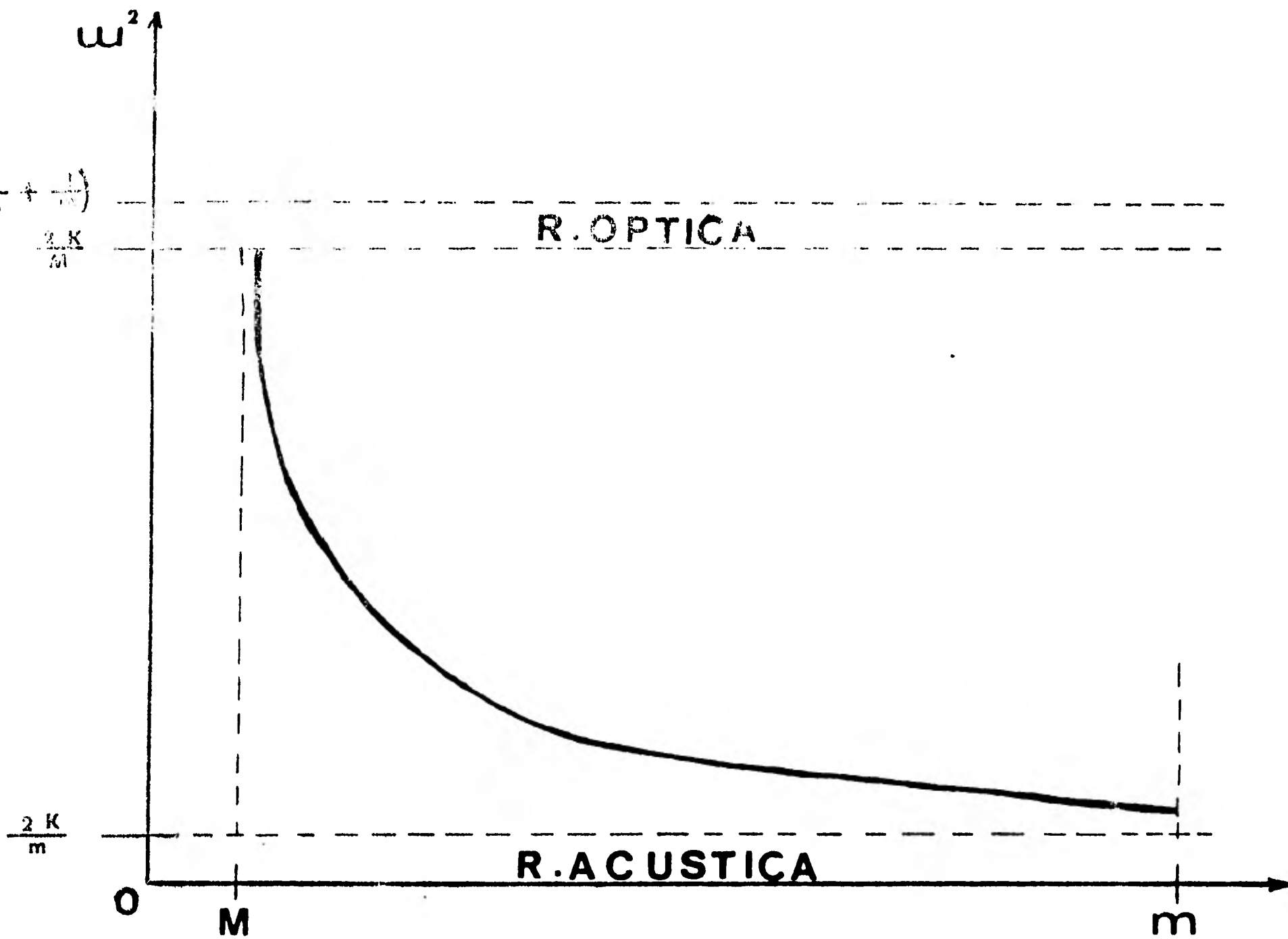


Gráfica 8.- Variación de la frecuencia de los modos localizados en función de la masa del átomo - impureza para el caso:

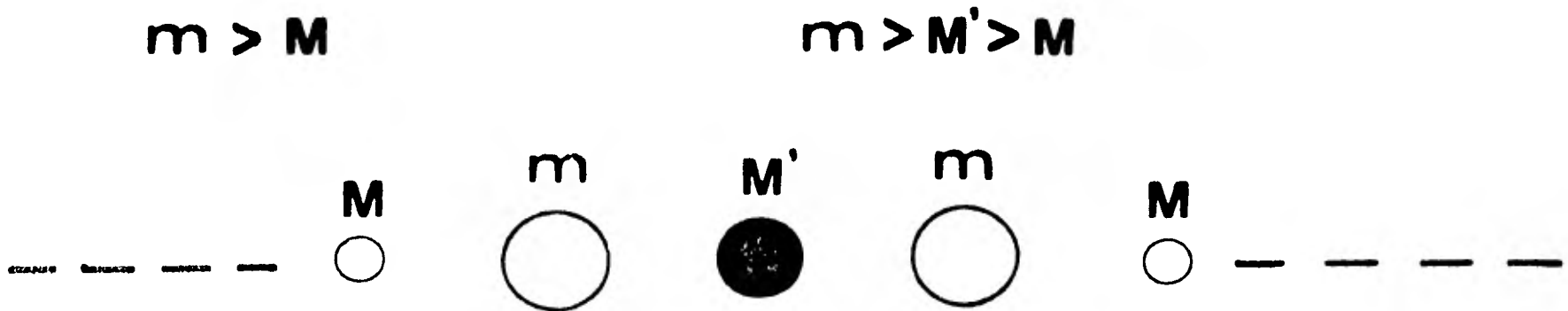
$$m > M$$

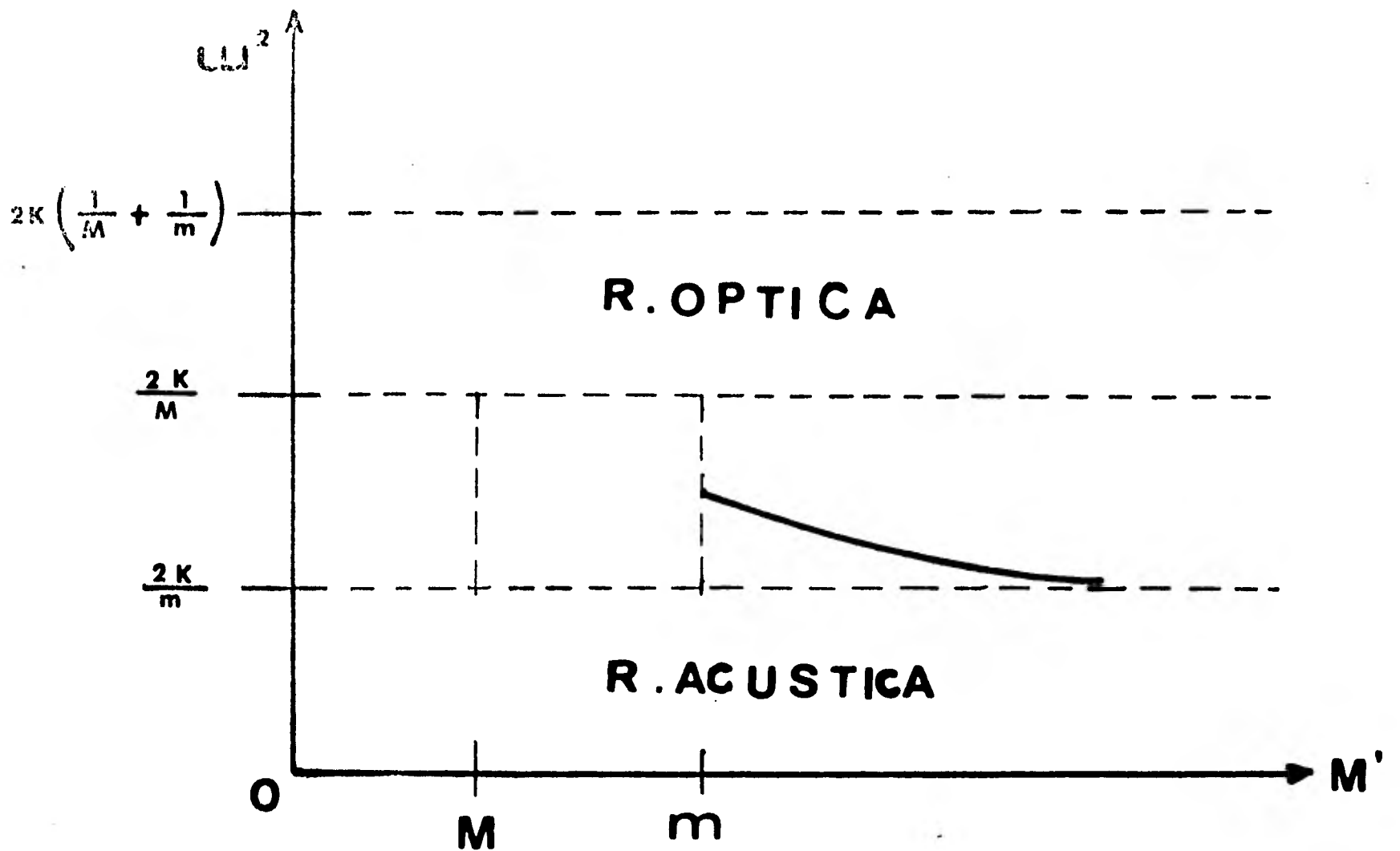
$$m > M > M'$$





Gráfica 9.- Variación de la frecuencia de los modos localizados en función de la masa del átomo - impureza para el caso:





$$m > M$$

$$M' > m > M$$



También se puede mostrar fácilmente que cuando las masas de los átomos que forman la cadena son iguales ( $M=m$ ) si la masa de la imperfección es menor que la masa de los átomos del cristal infinito se obtiene un modo localizado (Fig.23), y cuando la masa de la impureza es mayor que la masa de los átomos de la cadena no hay modo localizado, esto coincide con lo obtenido por otros autores<sup>1,2y18</sup>

En continuación vamos a mostrar las formas de los máximos desplazamientos y para ello utilizaremos:

- 1) La solución a las ecuaciones de movimiento de los átomos - (22.1) a (22.4)
- 2) Las condiciones de frontera (19) a (21).
- 3) Las ecuaciones de eigenvalores (43) a (48), y
- 4) Las relaciones de dispersión para los modos localizados - (40) y (46).

Considerando que las ondas que salen del centro dispersor no divergen, -  
la solución (22.1) a (22.4) toma la forma:

$$50.1) \quad U_N = B_1 \exp(-iN\theta) \quad N \text{ impar}, N < 0$$

$$50.2) \quad U_N = B_2 \exp(-iN\theta) \quad N \text{ par}, N \leq 0$$

$$50.3) \quad U_N = B_3 \exp(iN\theta) \quad N \text{ impar}, N > 0$$

$$50.4) \quad U_N = B_4 \exp(iN\theta) \quad N \text{ par}, N \geq 0$$

Sustituyendo estas ecuaciones en las condiciones de frontera (19) a (21):

para  $N = -1$

$$51) \quad B_1 = \left[ \frac{-2K \cos \theta}{m\omega^2 - 2K} \right] B_2$$

para  $N = 0$

$$52) \quad -m\omega^2 B_2 = K [B_1 \exp(i\theta) + B_3 \exp(i\theta) - 2B_2]$$

para  $N = 1$

$$53) \quad B_3 = \left[ \frac{-2K \cos \theta}{m\omega^2 - 2K} \right] B_2$$

de la condición de continuidad para la solución (23),  $B_2 = B_4$ ,  
sustituyendo esto en las ecuaciones (51) y (53), se tiene que  $B_1 = B_3$ ,  
por lo que la relación de amplitudes para los modos localizados es:

$$54) \quad B_1 = \left[ \frac{-2K \cos \theta}{m\omega^2 - 2K} \right] B_2$$

Utilizando esta relación y normalizando la amplitud resultante ( $B_2 = 1$ ),  
los desplazamientos de los átomos están dados por:

$$U_N = \left[ \frac{-2K \cos \theta}{m\omega^2 - 2K} \right] \exp(-iN\theta) \quad N \text{ impar}, N < 0$$

$$U_N = \exp(-iN\theta) \quad N \text{ par}, N \leq 0$$

$$U_N = \left[ \frac{-2K \cos \theta}{m\omega^2 - 2K} \right] \exp(iN\theta) \quad N \text{ impar}, N > 0$$

$$U_N = \exp(iN\theta) \quad N \text{ par}, N \geq 0$$



Para modos localizados  $\theta = \xi + i\mu$ , con  $\xi = \frac{n\pi}{2}$  para el caso impar, considerando  $n = 1$ :  $\xi = \frac{\pi}{2}$  por tanto  $\text{Cos}\theta = \text{Cos}(\frac{\pi}{2} + i\mu) = -i\text{Senh}\mu$  con  $X = \exp(2\mu)$ :

$$55) \quad \text{Cos}\theta = \left( \frac{X^{1/2} - X^{-1/2}}{2} \right) (-i)$$

$$\exp(iN\theta) = \exp\left[iN\left(\frac{\pi}{2} + i\mu\right)\right] = X^{-N/2} \left[ \exp\left(\frac{\pi i}{2}\right) \right]^N$$

$$56) \quad \exp(iN\theta) = X^{-N/2} (i)^N$$

Análogamente para el caso  $n$  par, con  $n=2$ :  $\xi = \pi$

$$57) \quad \text{Cos}\theta = \frac{-(X^{1/2} + X^{-1/2})}{2}$$

$$58) \quad \exp(iN\theta) = X^{-N/2} (-1)^N$$

Debido a la simetría de la solución con respecto a la impureza solo obtendremos las ecuaciones de los desplazamientos de los átomos a la derecha de la impureza incluida esta, aun así graficaremos a ambos lados de la misma. Utilizando las ecuaciones (55) a (58), los desplazamientos de los átomos quedan representados por las ecuaciones:

$$59.1) \quad U_N = \frac{-\left[ X_1^{-(N-1)/2} - X_1^{-(N+1)/2} \right]}{2 - Y_1} (i)^{N+1} \quad N \text{ impar, } N > 0$$

$$59.2) \quad U_N = X_2^{-N/2} (i)^N \quad N \text{ par, } N \geq 0$$

donde  $Y_1 = \frac{mW_1^2}{K}$ , para la solución impar.

$$59.3) \quad U_N = \frac{- \left[ X_2^{-(N-1)/2} + X_2^{-(N+1)/2} \right]}{2 - Y_2} (-1)^N \quad N \text{ impar, } N > 0$$

$$59.4) \quad U_N = X_2^{-N/2} (-1)^N \quad N \text{ par, } N \geq 0$$

donde  $Y_2 = \frac{mW^2}{K}$ , para la solución par.

Los subíndices 1 y 2 indican que la solución es impar o par respectivamente.

Con la definición  $Y = \frac{mW^2}{K}$  las frecuencias de los modos localizados son:

$$60) \quad Y_1 = \frac{1}{(1 - \epsilon')} \left[ (1 - \epsilon') + \frac{X_1}{2} + \frac{1}{X_1} \left( \frac{1}{2} - \epsilon' \right) \right] \quad \text{solución impar.}$$

$$61) \quad Y_2 = \frac{1}{(1 - \epsilon')} \left[ (1 - \epsilon') - \frac{X_2}{2} + \frac{1}{X_2} \left( \epsilon' - \frac{1}{2} \right) \right] \quad \text{solución par.}$$

Las condiciones de frontera se pueden reescribir como:

$$62.1) \quad N = -1 \quad YU_{-1} + U_{-2} + U_0 - 2U_{-1} = 0$$

$$62.2) \quad N = 0 \quad \frac{m'W^2}{K} U_0 + U_{-1} + U_1 - 2U_0 = 0$$

$$62.2) \quad N = 1 \quad YU_1 + U_0 + U_2 - 2U_1 = 0$$

Las cuales son satisfechas por frecuencia y los desplazamientos de los átomos para cada modo localizado obtenido con las condiciones ya dadas.

Las siguientes graficas muestran la forma y variación de los modos localizados para cristales ideales, se hace notar el nivel de la frecuencia para cada uno de ellos.

De acuerdo a la definición  $\epsilon = \frac{M}{m}$ ,  $\epsilon$  nos define la cadena diatómica para cada relación de masas, solo consideraremos en forma general dos casos:

a) Si  $M > m$ ,  $\epsilon = 2$

b) Si  $M < m$ ,  $\epsilon = \frac{1}{4}$

En las gráficas se muestran desplazamientos verticales para hacer notar con énfasis los movimientos de los átomos, sin embargo tales desplazamientos son longitudinales. La columna del centro o de la derecha en cada gráfica muestra el espectro de frecuencias para el cristal dado y la ubicación de la frecuencia de los modos localizados.

En las gráficas de las figuras (11) a (25) las líneas punteadas indican los desplazamientos de los átomos en posición impar ( $m$ ), y las líneas continuas los desplazamientos de los átomos en posición par ( $M$ ). El número (1) indica que la solución es impar, y el (2) que tal solución es par.

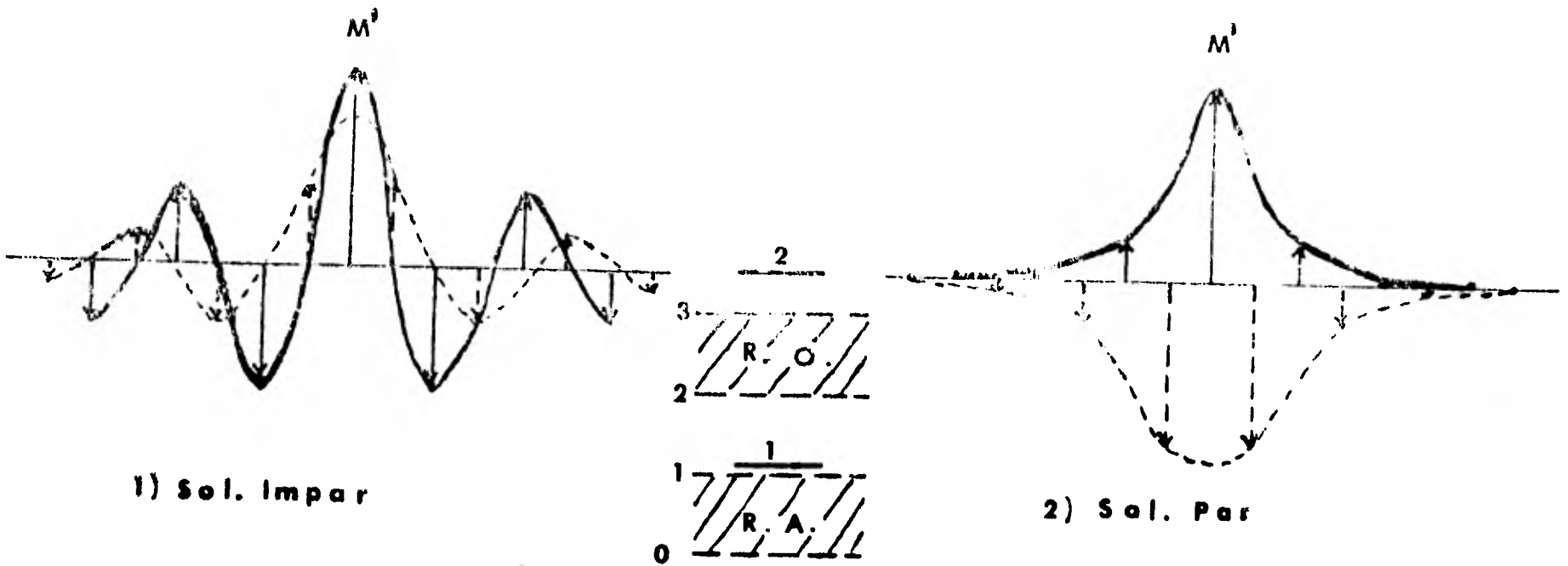


Fig. 11.- Máximos desplazamientos atómicos unidades arbitrarias (u.a.) como función de la posición; para el caso:  $\epsilon = 2$ ;  $M > m > M'$ ;  $M = 4$ ,  $m = 2$ ,  $M' = 2.1$

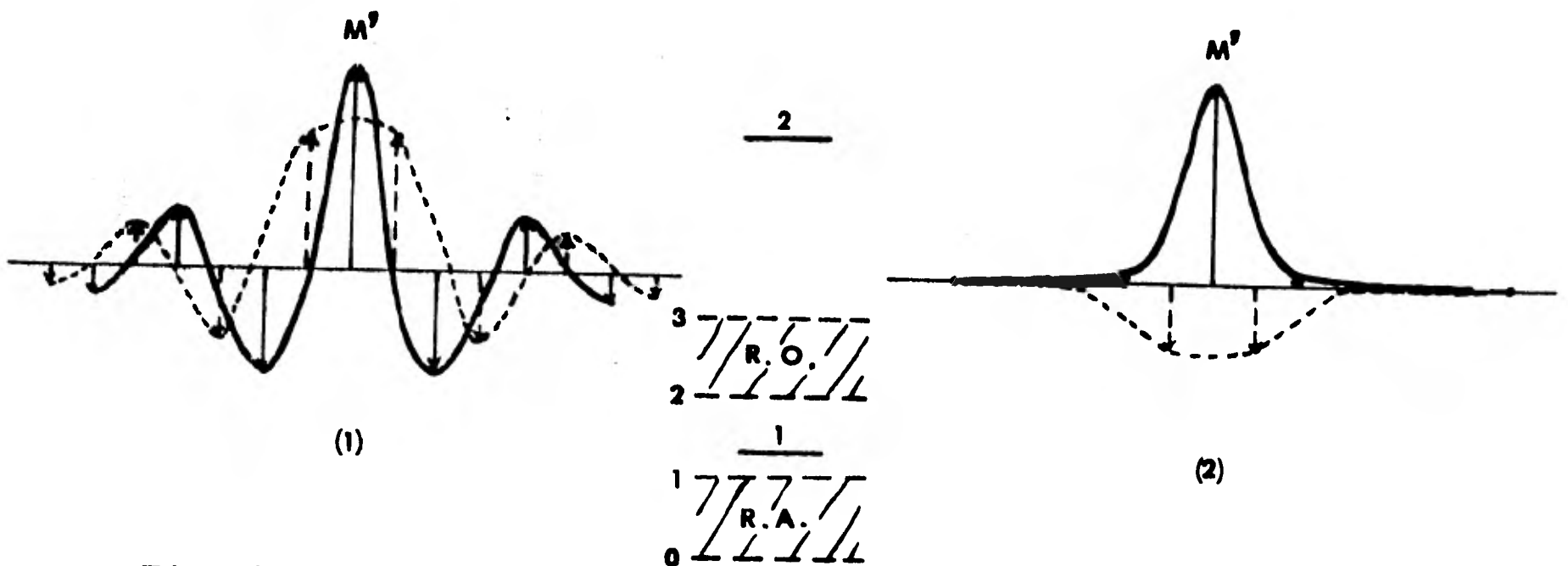


Fig. 12.- Máximos desplazamientos atómicos (u.a.) como función de la posición, para el caso:  
 $\epsilon = 2$ ;  $M > m > M'$ ;  $M = 4$ ,  $m = 2$ ,  $M' = 1$

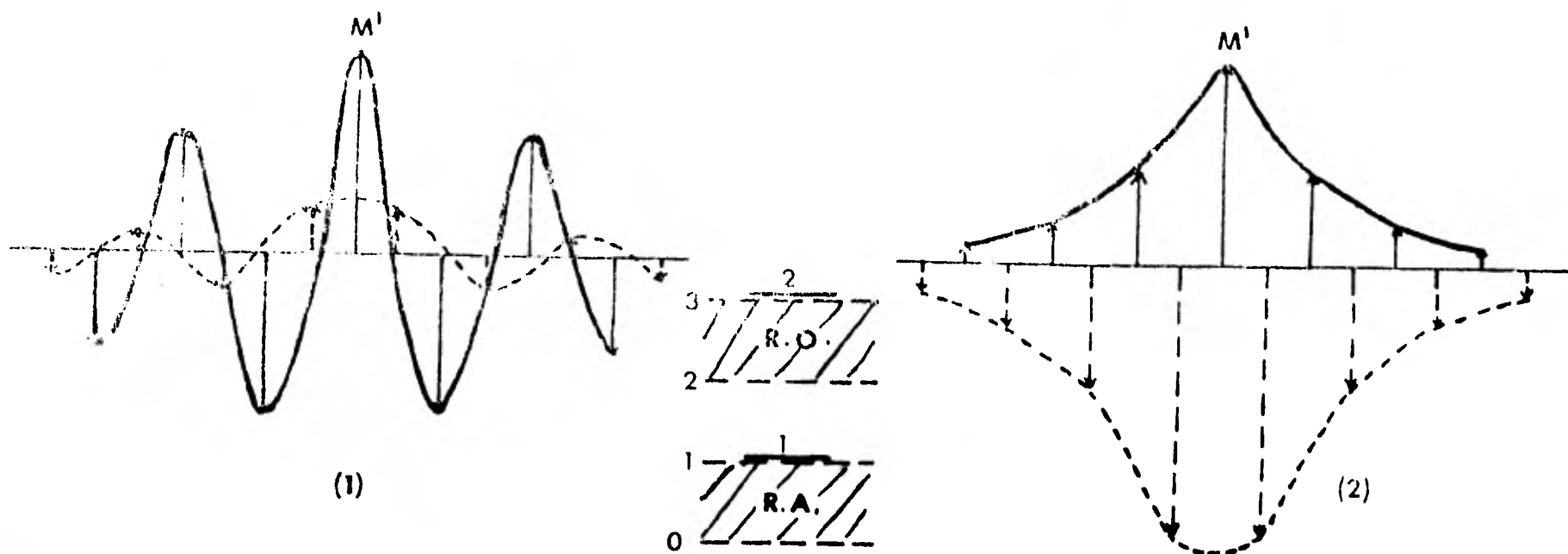


Fig. 13.- Máximos desplazamientos atómicos (u.a.) como función de la posición, para el caso:  
 $\epsilon = 2$  ;  $M > M' > m$  ;  $M = 4$ ,  $m = 2$ ,  $M' = 3$

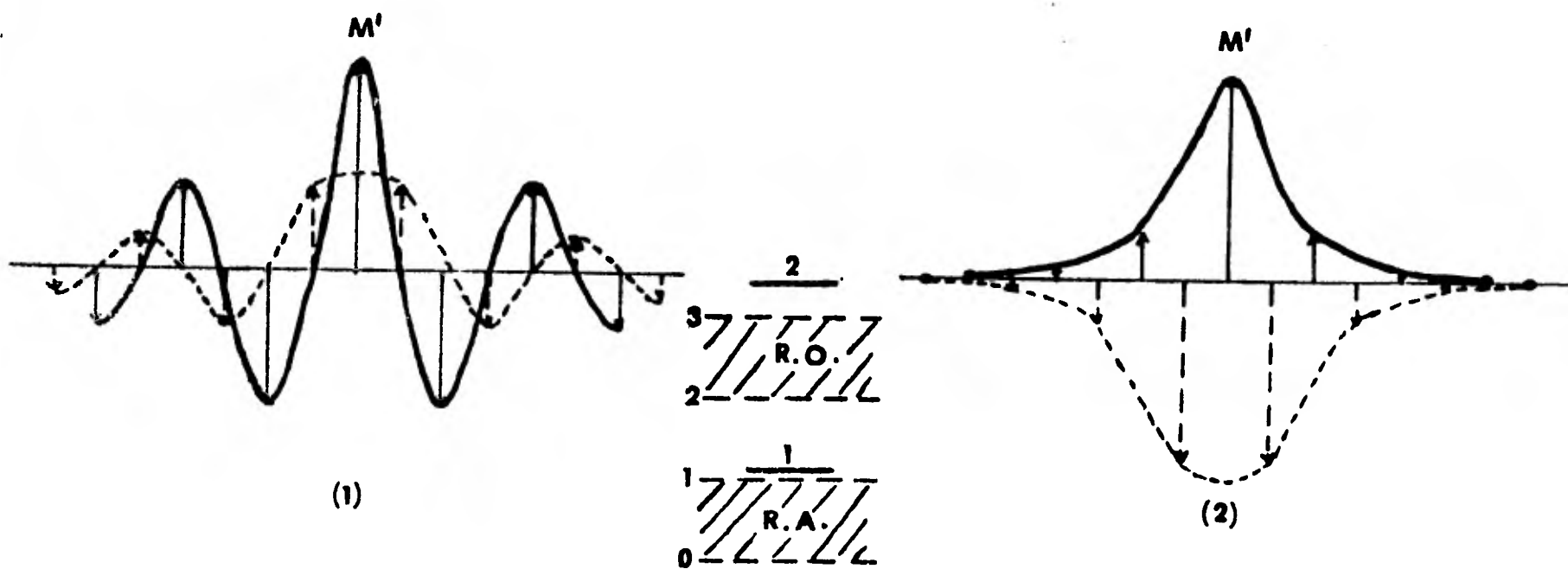


Fig. 14.- Máximos desplazamientos atómicos (u.a.) como función de la posición, para el caso:  
 $\epsilon = 2$  ;  $M > M' > m$  ;  $M = 4$ ,  $m = 2$ ,  $M' = 2.2$

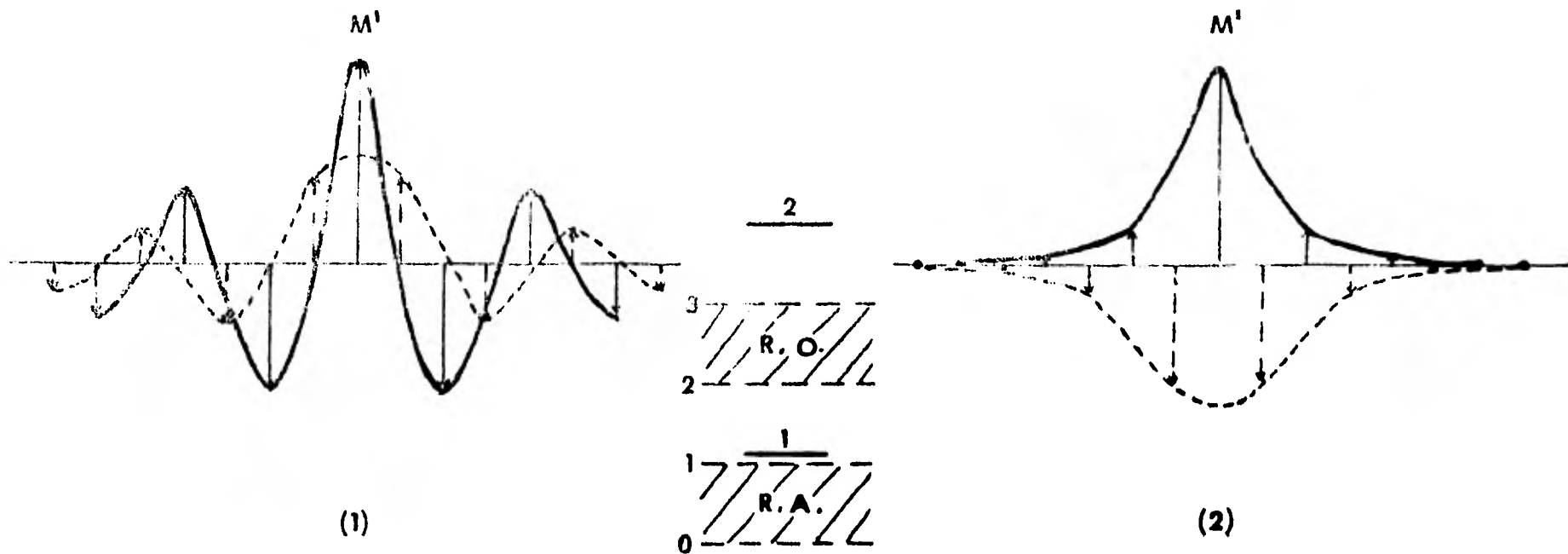


Fig. 15.- Máximos desplazamientos atómicos unidades arbitrarias (u.a.) como función de la posición, para el caso:  $\xi = 2$  ;  $M > m = M'$  ;  $M = 4$ ,  $m = M' = 2$

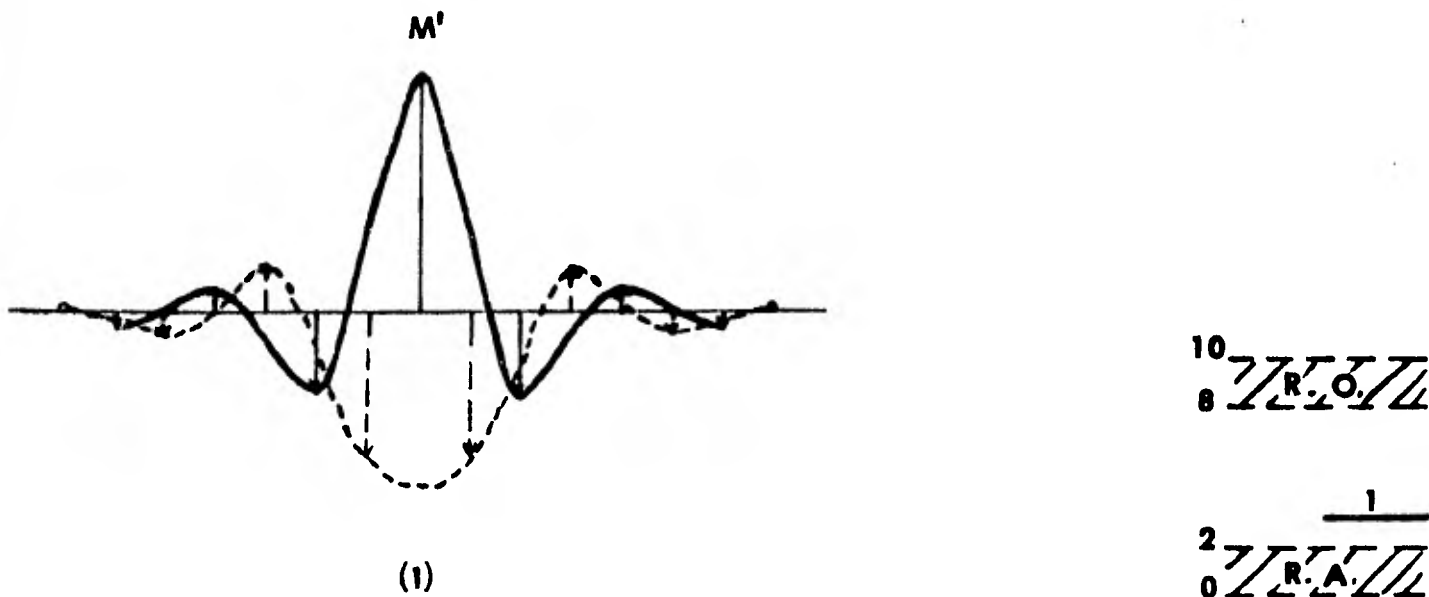
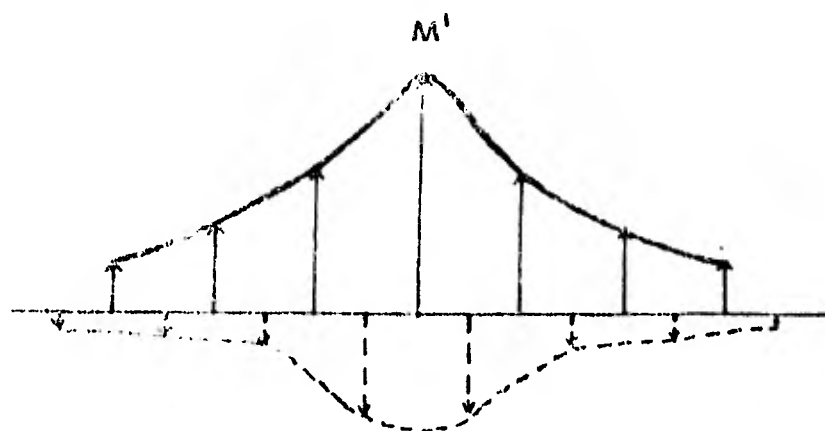


Fig. 16.- Máximos desplazamientos atómicos unidades arbitrarias (u.a.) como función de la posición, para el caso:  $\xi = 1/4$  ;  $M < m = M'$  ;  $M = 1$ ,  $m = M' = 4$



(2)

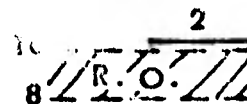
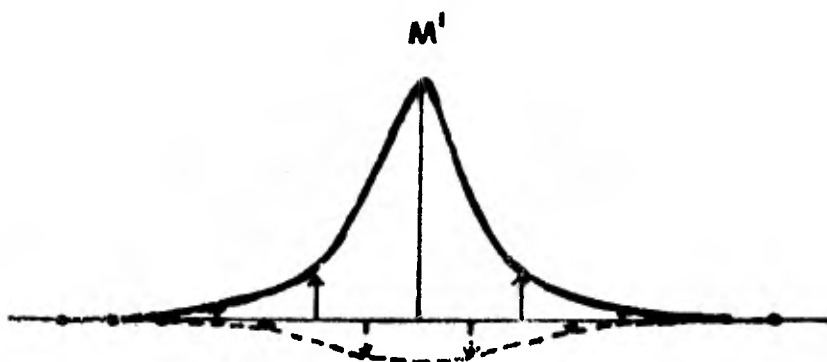


Fig. 17.- Máximos desplazamientos atómicos (u.a.) como función de la posición, para el caso:  $\epsilon = 1/4$  ;  $m > M > M'$  ;  $M = 1$ ,  $m = 4$ ,  $M' = 0.95$



(2)

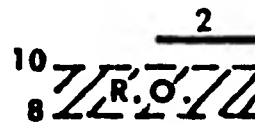


Fig. 18.- Máximos desplazamientos atómicos (u.a.) como función de la posición, para el caso:  $\epsilon = 1/4$  ;  $m > M > M'$  ;  $M = 1$ ,  $m = 4$ ,  $M' = 0.8$

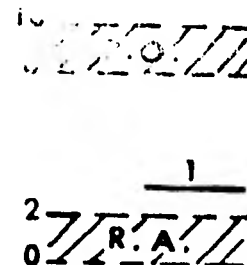
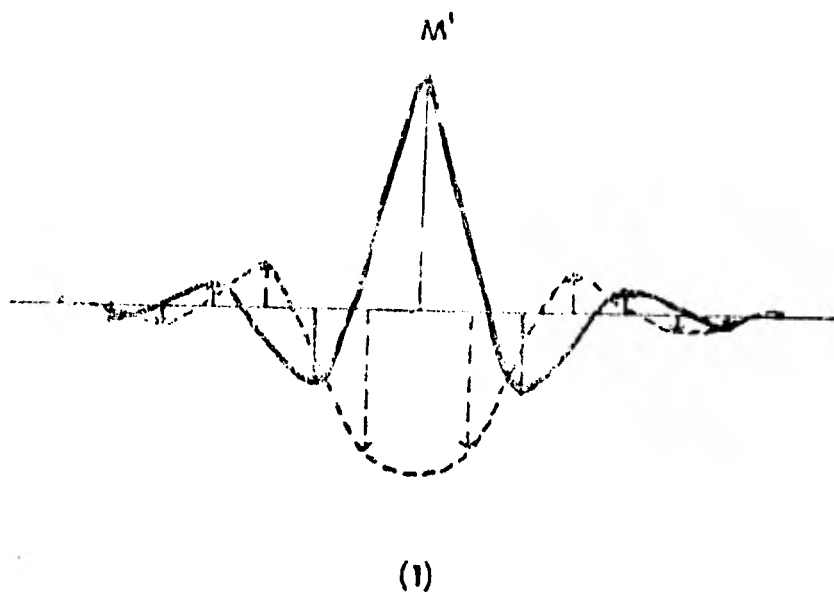


Fig. 19.- Máximos desplazamientos atómicos (u.a.) como función de la posición, para el caso:  $\epsilon = 1/4$  ;  $m > M' > M$  ;  $M = 1, m = 4, M' = 3.9$

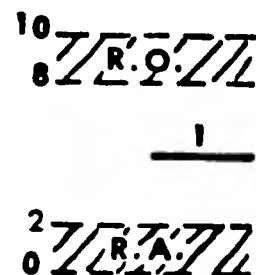
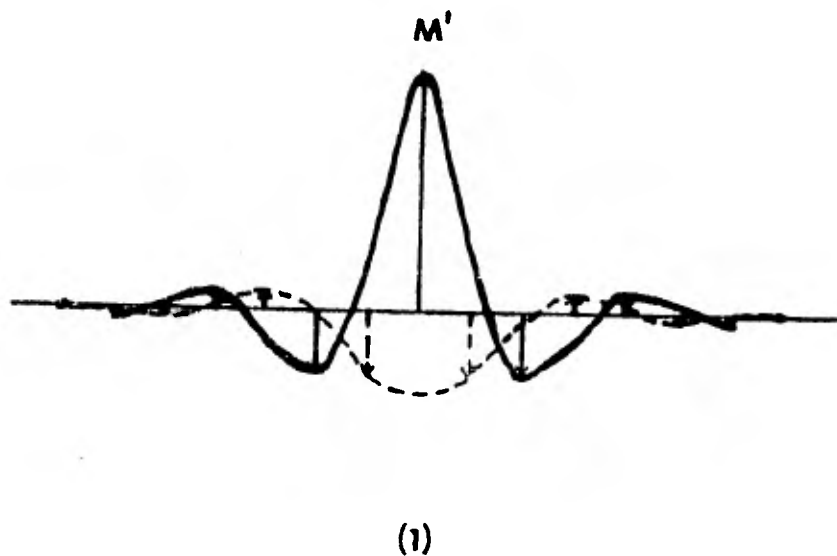


Fig. 20.- Máximos desplazamientos atómicos (u.a.) como función de la posición, para el caso:  $\epsilon = 1/4$  ;  $m > M' > M$  ;  $M = 1, m = 4, M' = 2$



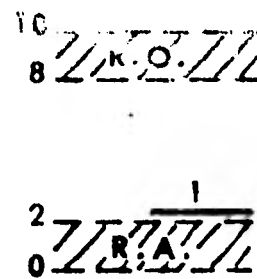
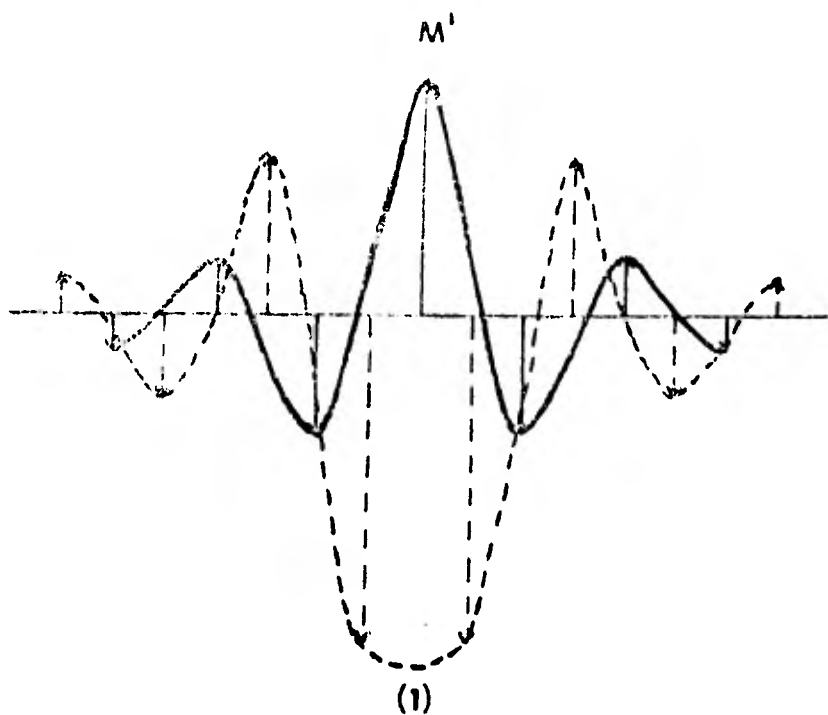


Fig. 21.- Máximos desplazamientos atómicos (u.a.) como función de la posición, para el caso:  $\epsilon = 1/4$  ;  $M' > m > M$  ;  $M = 1$ ,  $m = 4$ ,  $M' = 8$

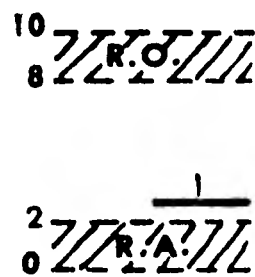
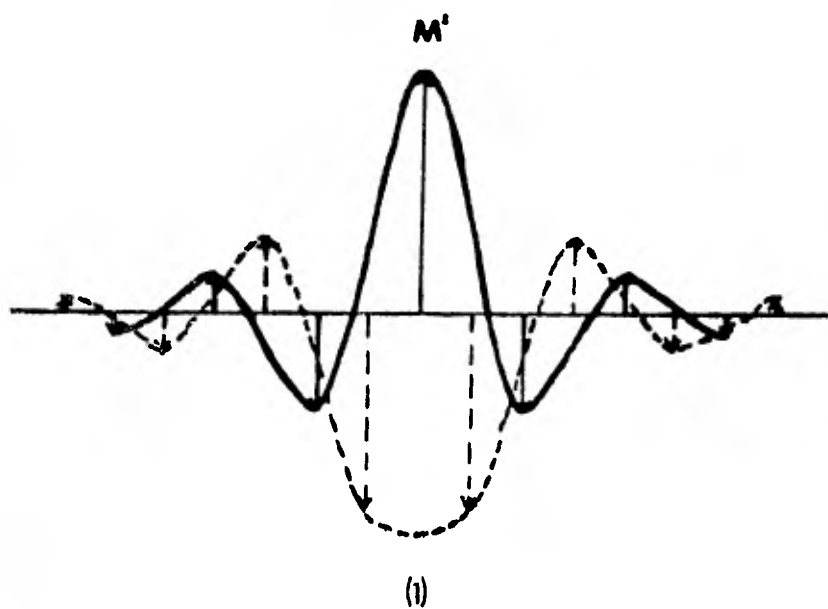


Fig. 22.- Máximos desplazamientos atómicos (u.a.) como función de la posición, para el caso:  $\epsilon = 1/4$  ;  $M' > m > M$  ;  $M = 1$ ,  $m = 4$ ,  $M' = 4.2$

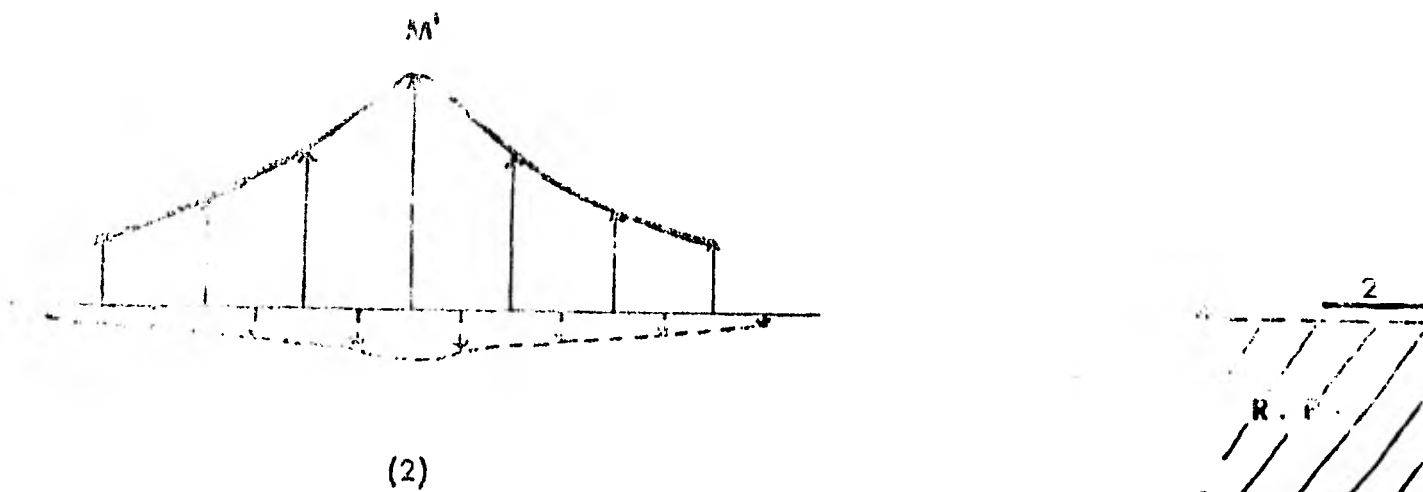


Fig. 23.- Máximos desplazamientos atómicos (u.a.) como función de la posición, para el caso:  $\xi = 1$  ;  $M = m > M'$  ;  $M = m = 1$ ,  $M' = 0.9$

(cadena monoatómica con impureza isotópica)



Fig. 24.- Máximos desplazamientos atómicos (u.a.) como función de la posición, para el caso:  $\epsilon = 0.087$   $m > M' > M$   
 $\text{Br}^- \text{Na}^+ \text{Li}^+$

$$M = 6.939, m = 79.909, M' = 22.989$$

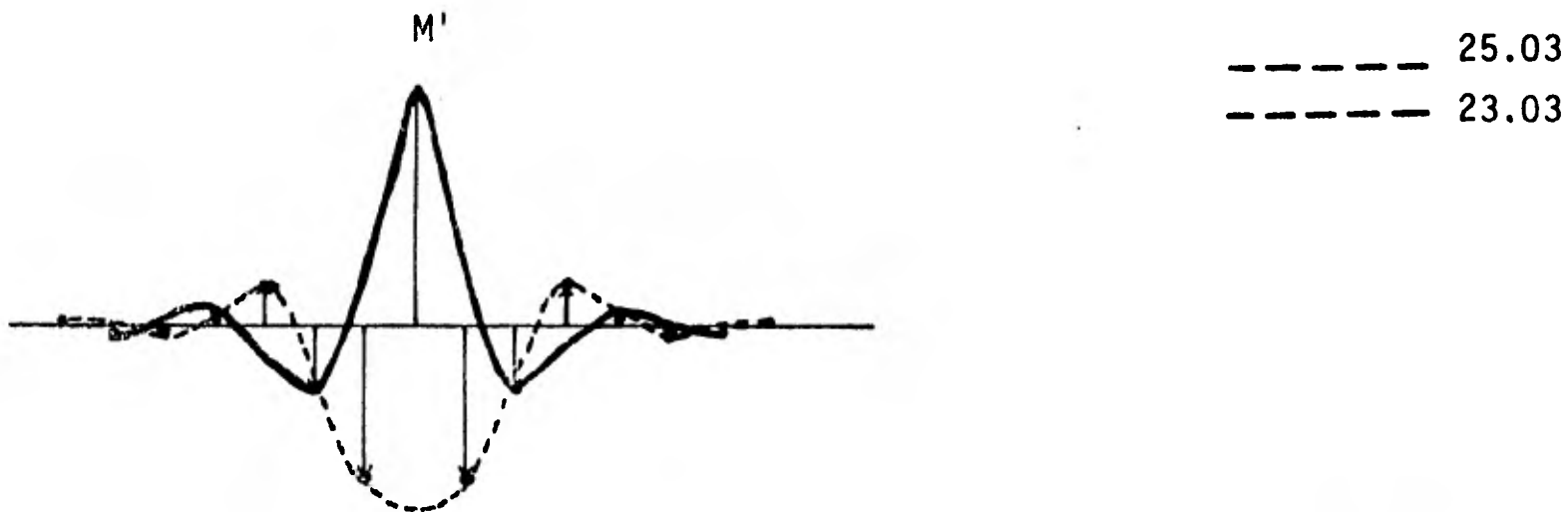


Fig. 25.- Máximos desplazamientos atómicos (u.a.) como función de la posición, para el caso:  $\epsilon = 0.087$   $M'_+ > m > M$   
 $\text{Rb}^+ \text{Br}^- \text{Li}^+$

$$M = 6.939, m = 79.909, M' = 85.47$$

De las gráficas anteriores podemos sacar algunas conclusiones de tipo general para las formas de los modos localizados, primero es claro que las formas de los modos con frecuencia por encima de la rama óptica son de tipo óptico ya que los desplazamientos de los átomos están defasados  $180^\circ$  y que las formas de los modos que tienen frecuencia en el gap son como las que encontró Wallis<sup>17</sup> para los modos de superficie, es decir, que se localizan por parejas, y son las únicas formas que se encuentran para todos los valores de los parámetros del sistema. También se puede observar que conforme la masa de la impureza disminuye, el modo de impureza se localiza más de manera que en algunos casos particulares el único átomo que se desplaza prácticamente es la impureza ver Fig. (12-2), (18-2) y (24), en este caso también la frecuencia de este modo aumenta considerablemente en magnitud resultado ya notado por otros autores.<sup>24</sup>

Las figuras (24) y (25) simulan cualitativamente una impureza de  $N_a^+$  y  $R_b^+$  en Li Br notándose que las conclusiones anteriores son válidas también en este caso.

En este capítulo hemos obtenido las frecuencias y formas de los modos localizados y hemos mostrado que los resultados coinciden con los de Mazur et al<sup>4</sup> que utilizan condiciones de frontera fijas en sus cálculos, esto significa para nosotros que la existencia de modos localizados es independiente del número de átomos que se tengan en la cadena, lo cual coincide con el resultado de Bala et al<sup>8</sup> en donde ellos mencionan que si el número de átomos cambia de 5 a 21 los cambios en frecuencia son muy pequeños.

#### CONCLUSIONES

En este trabajo podemos considerar que el resultado más importante es el haber resuelto en forma analítica utilizando el método de la matriz de dispersión el problema de una cadena diatómica infinita con impureza isotópica. Este método para

obtener la solución ha mostrado que es más sencillo que otras técnicas, por ejemplo, la función de Green, la matriz de transferencia, etc., y que puede ser aplicado a redes tridimensionales Achar et al<sup>3</sup> y Fukushima.<sup>19</sup> También la importancia de la solución analítica en este caso nos parece más trascendente ya que ha sido mostrado por Lucovsky et al<sup>7</sup> que este modelo unidimensional sencillo cuando es un poco modificado da mejores resultados cuantitativos para las frecuencias de los modos localizados que checan mejor con los valores experimentales que los cálculos tridimensionales más complicados.

También hemos mostrado que la solución del problema de una impureza isotópica en una cadena diatómica infinita coincide con los resultados obtenidos por Bała et al,<sup>8</sup> que usan condiciones de frontera libres y a su vez con los de Mazur et al<sup>4</sup> que usan condiciones de frontera fijas y, que es independiente el número de partículas<sup>8</sup>. Las condiciones de existencia y las frecuencias de los modos localizados son calculadas en este caso de manera que checaron las condiciones de frontera del problema. Esto significa que la solución de nuestro problema sí es la que satisface todos los requisitos para ser solución, hay que hacer notar que la mayoría de los autores no hacen esta comprobación de manera que las soluciones que se presentan en general para las frecuencias pueden no ser soluciones del problema como ha sido resaltado recientemente por L. Andrade.<sup>15</sup> Finalmente haremos énfasis en el hecho de que nuestros resultados coinciden con los obtenidos por otros autores, por lo que se refiere a las frecuencias de los modos localizados y a las condiciones de existencia, pero también indicaremos que hemos mostrado las formas de los máximos desplazamientos atómicos de tal manera que los modos con frecuencia en el gap -- tienen una forma para sus máximos desplazamientos y, los modos con frecuencia por arriba de la rama óptica tienen otra forma.

Podríamos intentar extender este modelo al aplicarlo a problemas con un mayor número de imperfecciones no solamente impurezas isotópicas sino también cambios en los potenciales de in-

teracción de la imperfección<sup>6,8</sup> o incluir los efectos de interacciones más complejas,<sup>20</sup> pero recientemente se ha desarrollado en el Grupo de Superficies de la Facultad de Ciencias, U.N.A.M. una técnica<sup>14,15</sup> que simplifica sorprendentemente los cálculos de este tipo de problemas.

BIBLIOGRAPHY

- 1) Y. Fujuda, J.Phys. Soc. Japan 17,766 (1962).
- 2) J. Hori and T. Asahi, Progr.Theoret.Phys.(Kyoto) 31,49(1964).
- 3) B.N.N.Achar and G.R.Barsch, Phys.Rev.188-3,1356(1969).
- 4) P.Mazur, E.W.Montroll, and R.B.Potts, J.Wash.Acad.Sci. 46,2(1956).
- 5) J.Heri and T.Asahi,Progr.Theoret.Phys., 31,49(1964).
- 6) R.L.Bjork, Phys. Rev., 105,456(1957).
- 7) Lucovsky G., Brodsky M.H. and Burstein E.,Phys.Rev.(B) 2,3295(1970).
- 8) S.Bala D.P.S.Malik and A.K.Ghatak, J.Phys.and Chem. Solids 33-10,1885(1972).
- 9) A.Miranda, C.H.Saavedra y L.Andrade,Bol.Soc.Mex.Fis.4, 183(1977).
- 10) R.H. Munn, J. Chem. Phys. 52,64(1970).
- 11) R. Weinstock, am.J.Phys. 38,1289(1970).
- 12) De loach B. Jr. and Shaffer W.H., J.Mol.Spacetr.6,229 (1961).
- 13) Lee S.M. and Shaffer W.H., J.Mol.Spacetr.21,183(1966).
- 14) L.Andrade, Fourth International Conference on Solid Surfaces and Third European Conference on Surface - Science. Cannes. France. Sep.(1980).
- 15) L.Andrade, Proc.II Int.Conf. "Recent Progress in Many Body Theories". Lectures Notes in Physics.Ed.Springer-Verlag(1981).
- 16) L.Brillouin, Wave Propagation in Periodic Structures, Dover Publ; (1953).

- 17) R.F.Wallis, Phys.Rev. 105,540(1957).
- 18) E.W.Montroll and R.B.Potts,Phys.Rev.100,525(1955).
- 19) M.Fukushima, Progr.Theoret.Phys. 33,4(1965).
- 20) L.Andrade, Proc.Figth.Simp.Lat.Phys.Stat.Sol.1977  
Lima,Perú.