



17745
UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

MODOS LOCALIZADOS EN LA
INTERFASE DE DOS CRISTALES

T E S I S

que para obtener el título de

F I S I C O

p r e s e n t a :

MOISES RICARDO ZURITA

CD. UNIVERSITARIA, D. F., 1983



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.

T E S I S.

MODOS LOCALIZADOS EN LA INTERFASE DE DOS CRISTALES.

C O N T E N I D O.

DEDICATORIAS.....	I
AGRADECIMIENTOS.....	IV
INTRODUCCION.....	1
CAPITULO I MODOS VIBRACIONALES LOCALIZADOS Y LA TECNICA DE LA MATRIZ "S".	
I-1.- La Matriz "S" en problemas de vibraciones.....	7
I-2.- Una aplicación de la Matriz "S".....	10
I-3.- Las singularidades de la Matriz "S" y los modos localizados....	14
RESUMEN.....	16
CAPITULO II MODOS VIBRACIONALES LOCALIZADOS EN LA INTERFASE DE DOS CRISTALES..	
II-1.- Antecedentes.....	17
II-2.- Dos Cristales Monoatómicos Semi-infinitos.....	19
RESUMEN.....	31
CAPITULO III MODOS LOCALIZADOS EN LA INTERFASE CON IMPUREZAS.	
III-1.- Impurezas isotópicas.....	32
RESUMEN.....	46
CONCLUSIONES.....	48
BIBLIOGRAFIA.....	51

I N T R O D U C C I O N .

En la teoría del Estado Sólido, se manejan cosas como la idea de que los átomos en un material sólido están en constante movimiento vibracional, cuyas frecuencias y amplitudes se comprenden fácilmente si pensamos en un modelo simplista de un sólido que tenga las siguientes características: a) Ninguno de los átomos del sólido puede desplazarse desde su posición de equilibrio una distancia más allá, de donde se pueda aplicar la ley de Hooke; b) El movimiento de los átomos está limitado a una dimensión. Así los átomos del sólido se pueden tratar como si fueran pequeños osciladores armónicos. De ésta manera la frecuencia de vibración está dada por la fórmula para un oscilador armónico simple:

$$v = \frac{1}{2\pi} \sqrt{K/m}$$

donde K es la constante de la fuerza de Hooke y m la masa del átomo. Para determinar la amplitud del movimiento vibracional de los átomos del sólido, se debe determinar la energía del oscilador armónico como la suma de su energía cinética más su energía potencial en cualquier punto, ésto es:

$$E = \frac{mv^2}{2} + \frac{Kx^2}{2}$$

donde v es la velocidad del átomo, m su masa y x el desplazamiento desde su posición de equilibrio. La amplitud máxima A en el movimiento vibracional de los átomos, se determina cuando la energía es sólo potencial, así que:

$$E_p = 1/2 (KA^2) \quad \therefore \quad A = \sqrt{\frac{2E_p}{K}}$$

siendo E_p la energía total potencial. (16)

La energía interna de un sólido radica precisamente, en el movimiento vibracional de sus átomos. Si se eleva la temperatura del sólido, su energía interna cambia y por tanto el movimiento vibracional de sus átomos, de modo que la amplitud A de dicho movimiento tiene que ver con la temperatura del sólido. En otras palabras, el calor específico de un sólido depende del movimiento vibracional de sus átomos; De manera más rigurosa, se debía determinar la energía media de un oscilador armónico unidimensional en equilibrio térmico, teniendo que ver aquí el factor de Boltzman con la energía E de tal oscilador. La energía media se encuentra integrando sobre todas las energías posibles:

$$\bar{E} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} E e^{-E/kT} dv dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-E/kT} dv dx}$$

de donde se obtiene que $\bar{E} = 1/2 KA^2 = kT$ y finalmente:

$$\bar{A} = \sqrt{\frac{2kT}{K}}$$

donde k es la constante de Boltzman, T la temperatura y K la constante de la fuerza de Hooke.

El calor específico de un sólido⁽²⁾ en tres dimensiones esta dado por:

$$c_v = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_v$$

siendo la energía interna U , la suma de las energías de los osciladores armónicos en cada uno de los ejes de coordenadas. ya que $\bar{E} = kT$ en cada eje, tenemos:

$$U = 3kT = 3N_0 kT = 3RT$$

y finalmente:

$$U = 3RT \quad \therefore \quad c_v = 3R$$

Para Einstein, el calor específico debe estar dado por la cuantización de la energía en un múltiplo de $h\nu$, así que la energía media de un oscilador armónico está da-

da por:

$$\bar{E} = \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1}$$

de manera que la energía interna es:

$$U = 3N_0 \bar{E} = \frac{3N_0 h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1}$$

y por lo tanto el calor específico del sólido es:

$$c_v = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_v = 3R \left(\frac{h\nu}{kT} \right)^2 = \frac{e^{h\nu/kT}}{(e^{h\nu/kT} - 1)^2}$$

Peter Debye consideró al sólido como un cuerpo elástico continuo y no como una serie de átomos vibrando independientemente de sus vecinos, por lo que la energía interna de un sólido se establece como ondas elásticas con energía cuantizada, siendo un quantum de energía vibracional en el sólido, lo que se llama un "Fonon".

Debye, establece que un fonon de gas tiene el mismo comportamiento que un fotón de gas; así que la energía que contienen las ondas en el sólido, cuyo rango de frecuencias es ν a $\nu + d\nu$, está dada por:

$$n(\nu) \bar{E} d\nu = E$$

de aquí la energía total interna U en un volumen V es:

$$U = V \int_0^\nu n(\nu) \bar{E} d\nu$$

Debye supuso que el número total de ondas establecidas es igual a $3N_0$ grados de libertad de una mol de sólido, así que:

$$3N_0 = V \int_0^\nu n(\nu) d\nu$$

y la energía interna es:

$$U = \frac{9N_0}{v_m^3} \int_0^\nu \frac{h\nu^3 d\nu}{e^{h\nu/kT} - 1}$$

definiendo a $\theta = \frac{h\nu_m}{k}$ como la temperatura de Debye, la expresión para el calor específico es:

$$c_v = 9R \left[4 \left(\frac{T^3}{\theta} \right) \int_0^{\theta/T} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} - \left(\frac{\theta}{T} \right) \frac{1}{e^{\theta/T} - 1} \right]$$

Llamada fórmula de Debye para el calor específico.

La conductividad térmica en un sólido se entiende fácilmente, si suponemos que el sólido contiene un gas de fonones que están vibrando de manera normal, como si fueran osciladores pequeños y armónicos, así se puede calcular la energía interna a partir de la energía de vibración de cada oscilador.

Por otro lado, un sólido se puede estudiar como un sistema de muchas partículas, organizadas éstas en una estructura cristalina, a la que se le ha llamado "Cristal puro" si todas sus moléculas o átomos en su caso, son idénticos y en caso contrario, "Cristal defectuoso o cristal con impurezas".

Los efectos producidos por las impurezas o defectos en las frecuencias de los modos normales de vibración de un sistema de partículas, se estudió teóricamente en 1890 por Lord Rayleigh, cuyo resultado fue haber encontrado que algunos modos de vibración tienen frecuencia fuera de la banda permitida, no obstante, este resultado no se observó experimentalmente sino hasta 1958. En otras palabras, las impurezas en un cristal son la causa del cambio en los modos vibracionales del cristal puro, teniendo modos vibracionales con frecuencias por encima de la banda permitida, es decir, en la banda prohibida, a los que se les ha dado el nombre de "Modos localizados" debido a que su energía es grande en la propia impureza y cae rápidamente en los vecinos cercanos, así que entre otras cosas la existencia de un modo localizado, debería modificar el calor específico del sólido.

Hasta la actualidad se han detectado varios tipos de modos localizados, los de alta frecuencia cuya existencia se encuentra fuera de la banda permitida, es decir, en la banda prohibida, los de baja frecuencia que se encuentran dentro de la banda permitida, incluso existen los modos llamados "resonantes", introducidos recientemente en la astrofísica para dar una explicación acerca del incremento en la emisividad en el lejano infrarrojo de las concentraciones interestelares.

res. En otros estudios, los modos localizados se emplean como método de identificación de impurezas en sólidos.

No obstante que el trabajo en el estudio de los modos localizados, se ha intensificado en los últimos años hay mucho que hacer en este campo ya que esto nos daría la oportunidad de conocer con más detalle el comportamiento de la materia.

En particular, nosotros estamos interesados en los fenómenos que ocurren en la superficie de los sólidos desde el punto de vista teórico y pensamos en la superficie del sólido como el último átomo o los últimos de una cadena monoatómica semi-infinita con una o varias impurezas, o bien, como una cadena lineal monoatómica semi-infinita, en nuestro caso con y sin impurezas.

Existen varios métodos para atacar estos problemas, por ejemplo, el método de la onda reflejada, la matriz de dispersión, la función de Green etc. En particular el método de la matriz de dispersión fue introducido por primera vez, por Saxon y Huntner⁽⁷⁾ en 1949 para resolver el problema de una red monoatómica unidimensional en relación con algunas propiedades electrónicas. En 1953, Slater trata el problema de los niveles de energía para una impureza electrónica usando las ecuaciones de diferencia, también en 1953 y 54, Melvin Lax y Smith⁽⁸⁾ tratan el problema de perturbaciones localizadas, por medio de matrices. Los defectos y sus efectos, es el problema que Montroll y Potts resuelven usando el método de la función de Green, en 1955⁽⁹⁾. En 1957 se publica un artículo cuyos autores Hori y Asahi⁽¹⁰⁾ tratan las vibraciones desordenadas de una red lineal con el método de la matriz de transferencia, éste método es usado por Yoshiichi Fukuda⁽¹¹⁾ junto con el método de la matriz de dispersión para resolver el problema de una red monoatómica infinita con una impureza en el centro, demuestra que ambos métodos son equivalentes. Nuevamente son estos autores, Hori y Asahi⁽¹²⁾ quienes, en 1964 publican un trabajo en el que usan la matriz de dispersión para resolver el problema de modos de superficie cuyos efectos son estudiados también por Wallis⁽¹³⁾ en 1964. P. Masri y L. Dobrzynski, pu--

blican un artículo en el año 1973, en el que reportan el estudio de los modos localizados en la interfase entre dos cristales distintos mediante un modelo en el que se suponen los cristales como redes cúbicas semi-infinitas con el mismo parámetro de red "a" y masa M y M_a obteniendo la interfase por el acoplamiento entre las superficies libres, plano (001), con la constante de la fuerza de interacción K' . Utilizando el método matemático de la función de Green, obtienen que los modos de superficie de los dos cristales, se modifican debido a los modos localizados en la interfase, dentro de cierto rango de valores para la constante de interacción K' .

En este trabajo se resuelve el problema de la interfase entre dos cristales monoatómicos semi-infinitos con interacción a primeros vecinos, utilizando el método de la Matriz de Dispersión "S", obteniendo soluciones en forma analítica, encontrando las condiciones de existencia y la forma de los modos localizados.

C A P I T U L O I

MODOS VIBRACIONALES LOCALIZADOS Y LA TECNICA DE LA MATRIZ "S"

I-1.- LA MATRIZ "S" EN PROBLEMAS DE VIBRACIONES.

Cuando los átomos de una red vibran alrededor de sus posiciones de equilibrio, realizando movimientos periódicos alrededor de esas posiciones, siempre y cuando los desplazamientos sean pequeños, se puede suponer que las fuerzas entre los átomos circunvecinos están dadas por la ley de Hooke y que las interacciones son entre los vecinos más cercanos, o primeros vecinos, fig. 1, por lo que la fuerza sobre el n -ésimo átomo de una cadena unidimensional infinita es, en aproximación semiclásica:

$$F_n = \gamma (U_{n+1} + U_{n-1} - 2U_n) \quad (1)$$

donde γ es la constante de la ley de Hooke y U_n los desplazamientos de los átomos desde su posición de equilibrio.

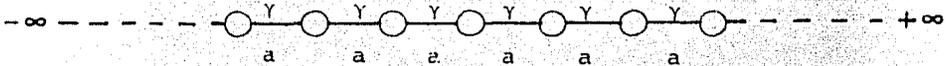


Fig. 1. Modelo de una red monoatómica lineal infinita.

Por la segunda ley de Newton tenemos que:

$$m \frac{d^2 U_n}{dt^2} = \gamma (U_{n+1} + U_{n-1} - 2U_n) \quad (2)$$

que es una ecuación diferencial y de diferencias a la que buscamos soluciones periódicas debido precisamente, a que los movimientos que realizan los átomos de la red son periódicos, así -

que se puede esperar que:

$$U_n = Ae^{i(\omega t - kna)} \quad (3)$$

en donde A es la amplitud del movimiento de los átomos, ω la frecuencia de vibración, k el número de onda, n el número de átomos y a la distancia interatómica de la red, sea una solución a la ec. (2). Diferenciando esta ec. dos veces respecto al tiempo y sustituyendo tenemos:

$$-m \omega^2 = \gamma (U_{n+1} + U_{n-1} - 2U) \quad (4)$$

la cual es ya una ec. de diferencias. Ahora las soluciones para U_{n+1} y U_{n-1} se pueden escribir como:

$$U_{n+1} = Ae^{i(\omega t - k(n+1)a)}$$

$$U_{n-1} = Ae^{i(\omega t - k(n-1)a)}$$

si cualquiera de estas ecs. que son soluciones de la ec. (2), la sustituimos en la ec. (4) obtenemos la siguiente relación:

$$m \omega^2 = 2 \gamma (1 - \cos ka) \quad (5)$$

donde "a" es la distancia interatómica o parámetro de la red. De aquí podemos obtener a ω en terminos de k:

$$\omega = \sqrt{\frac{4\gamma}{m}} (\sin \frac{1}{2} ka) \quad (6)$$

Ya que ω debe ser siempre positiva, existen soluciones de onda plana sin importar que la onda se propague hacia la derecha o hacia la izquierda a lo largo de la red, éstas ondas son independientes entre sí y la frecuencia ω se relaciona con "k" por la ec. (6). Esto quiere decir que se trata de un medio de dispersión, cuya relación de dispersión es precisamente ésta ec. Su gráfica se representa en la fig. 2.

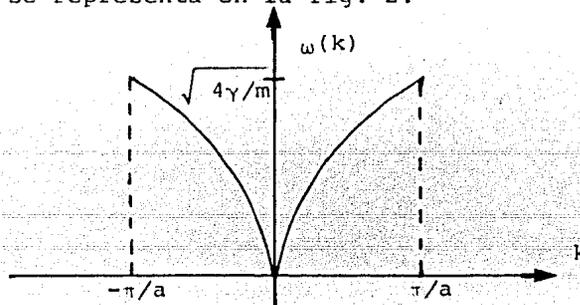


Fig. 2. Se representa $\omega(k)$ en una red monoatómica lineal.

Hagamos un breve análisis de lo dicho hasta aquí. Si tomamos valores de "k" mucho menores que π/a , ω varía en forma aproximadamente lineal con k, porque el $\text{sen } \frac{1}{2}ka \approx \frac{1}{2}ka$, ésto es:

$$\omega \approx ka \sqrt{\gamma/m}$$

de aquí podemos encontrar la velocidad de fase y la velocidad de grupo, dadas por las ecs.:

$$v_f = \frac{\omega}{k} = a \sqrt{\gamma/m}$$

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = a \sqrt{\gamma/m}$$

Esto quiere decir que para valores de k pequeños, longitudes de onda λ grandes. Estas velocidades son iguales, o bien que la dispersión deja de tener interés porque el medio se comporta como un medio continuo, homogéneo y elástico.

Por otro lado, si k se hace grande, λ se hace pequeña, entonces la velocidad de fase ya no es igual a la velocidad de grupo, éstas están dadas por las ecs:

$$v_f = \omega/k = a \sqrt{\gamma/m} \left| \frac{\text{sen } \frac{1}{2}ka}{\frac{1}{2}ka} \right|$$

$$v_g = a \sqrt{\gamma/m} \left| \cos \frac{1}{2}ka \right|$$

o lo que es lo mismo, los efectos de dispersión se hacen más importantes al aumentar k, ω ya no varía de manera lineal con ella. Naturalmente existe un valor límite máximo para k, dado por π/a , que corresponde al valor mínimo para λ dado por $2a$, debido a que la red está compuesta de átomos en forma discreta. En otras palabras, para todos los valores de k permitidos entre $-\pi/a$ y π/a , existe un valor de λ correspondiente y por lo tanto una frecuencia de vibración ω , a la que llamamos modo normal de vibración de la cadena; No obstante, como a la cadena pertenecen muchísimos átomos, digamos N átomos, y como la ec. (1) describe el movimiento vibracional de ellos, físicamente todas las soluciones independientes que satisfagan las condiciones de frontera, dan modos de vibración. Conviene decir aquí, que las condiciones de frontera físicas quienes limitan los valores de k, que a su vez permiten las soluciones a la ecuación diferencial del sistema, más aún, la ec. (4) con las condiciones de frontera nos da la frecuencia de los modos nor-

males de vibración en función de k , es decir, la relación de dispersión del sistema, por lo que el problema de una cadena monoatómica unidimensional puede resolverse por el método de la Matriz de Dispersión.

Cuando en una cadena monoatómica infinita se destruye la regularidad perfecta y aparece una impureza, entonces hay un centro dispersor diferente a todos los demás átomos de la red, fig. 3, por lo que las ondas vibracionales que viajan a lo largo del cristal en direcciones opuestas antes y después de la impureza deben acoplarse, este acoplamiento se expresa por la Matriz "S".

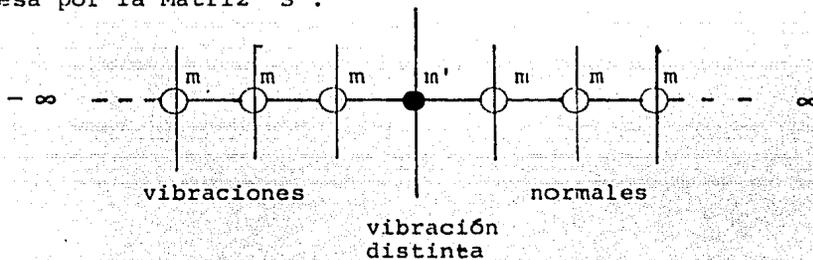


Fig.3 Se muestra la destrucción de la regularidad de una cadena lineal infinita, por una impureza de masa m' .

Se puede pensar en el centro dispersor como un potencial que dispersa las ondas vibracionales que viajan en direcciones opuestas. Este centro dispersor o impureza debe tener una condición de frontera que afecta a las soluciones de la ecuación de diferencias de la red, por lo que debemos esperar un comportamiento vibratorio diferente, así que debemos encontrar la frecuencia ω de vibración para el modo vibracional que resulta por la impureza, a través del método de la Matriz de dispersión.

I-2.- UNA APLICACION DE LA MATRIZ "S".

Como un ejemplo de la aplicación de la Matriz de dispersión, resolveremos el problema de una red lineal monoatómica infinita con una impureza en el centro, para lo cual proponemos el modelo mostrado en la fig.4. En este modelo los átomos de la red tienen una masa M , están numerados de $-\infty$ a ∞ y el átomo impureza se encuentra localizado en el cero

teniendo una masa M' . En la fig. también se muestran las ondas que entran y las que salen de la impureza, por medio de las flechas dibujadas a los lados de la misma.

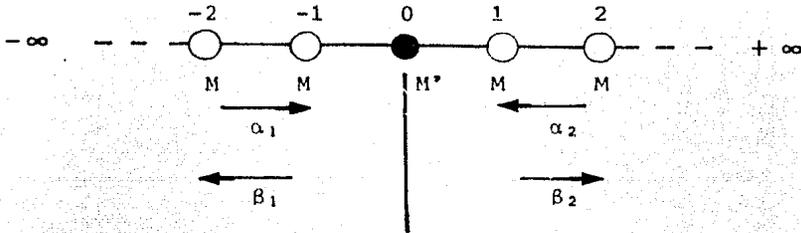


Fig.4 Modelo de una red monoatómica unidimensional infinita con una impureza en el centro.

Las ecuaciones de movimiento para los átomos y la impureza de la red son respectivamente:

$$M \omega^2 U(n) + \gamma (U_{n+1} + U_{n-1} - 2U_n) \quad \forall n \neq 0 \quad (7)$$

$$M \omega^2 U(0) + \gamma (U_1 + U_{-1} - 2U_0) \quad \forall n = 0 \quad (8)$$

En las que U_n es el desplazamiento del enésimo átomo, ω la frecuencia de vibración, γ es la constante de la fuerza de Hooke entre los átomos y "a", el parámetro de la red supuesto igual a 1. Siguiendo el trabajo de Fukuda (11), proponemos las siguientes soluciones:

$$U_n = \begin{cases} \alpha_1 e^{ikn} + \beta_1 e^{-ikn} & \forall n \leq 0 \\ \alpha_2 e^{-ikn} + \beta_2 e^{ikn} & \forall n \geq 0 \end{cases} \quad (9)$$

Si sustituimos cualquiera de las soluciones en la ecuación (7) se obtiene la relación de dispersión para el cristal infinito:

$$M \omega^2 = 2 \gamma (1 - \cos k) \quad (10)$$

Ahora, en el átomo impureza debe haber continuidad en su máximo desplazamiento, por lo que tenemos:

$$\alpha_1 + \beta_1 = \alpha_2 + \beta_2 \quad (11)$$

Las ecuaciones 8 y 11 son las condiciones de frontera del problema. Resolviendo simultáneamente estas ecuaciones para encontrar β_1 y β_2 en términos de los coeficientes α_1 y α_2 se ob-

tiene:

$$\beta_1 = -\alpha_1 \left(\frac{M'\omega^2 + \gamma(e^{ik} + e^{-ik-2})}{M'\omega^2 + 2\gamma(e^{ik-1})} \right) - \alpha_2 \left(\frac{\gamma(e^{-ik} - e^{ik})}{M'\omega^2 + 2\gamma(e^{ik-1})} \right)$$

$$\beta_2 = -\alpha_1 \left(\frac{\gamma(e^{-ik} - e^{ik})}{M'\omega^2 + 2\gamma(e^{ik-1})} \right) - \alpha_2 \left(\frac{M'\omega^2 + \gamma(e^{-ik} + e^{ik})}{M'\omega^2 + 2\gamma(e^{ik-1})} \right)$$

Poniendo estos resultados en términos de matrices, tenemos:

$$\begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} \quad (12)$$

donde la matriz "S" está dada por:

$$S = \begin{pmatrix} -\frac{M'\omega^2 + \gamma(e^{ik} + e^{-ik-2})}{M'\omega^2 + 2\gamma(e^{ik-1})} & -\frac{\gamma(e^{-ik} - e^{ik})}{M'\omega^2 + 2\gamma(e^{ik-1})} \\ -\frac{\gamma(e^{-ik} - e^{ik})}{M'\omega^2 + 2\gamma(e^{ik-1})} & -\frac{M'\omega^2 + \gamma(e^{-ik} + e^{ik-2})}{M'\omega^2 + 2\gamma(e^{ik-1})} \end{pmatrix} \quad (13)$$

Esta matriz contiene la dinámica del problema. Sus elementos tienen la particularidad de que:

$$S_{11} = S_{22} \quad Y \quad S_{12} = S_{21}$$

o lo que es lo mismo, esta matriz es simétrica, ésto es:

$$S^*S = 1 \quad (13a)$$

de donde:

$$1 = \begin{pmatrix} S_{11}^* & S_{12}^* \\ S_{21}^* & S_{22}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

lo que implica que existe una invarianza bajo reflexión, en otras palabras, hubiera sido lo mismo si hubiésemos considerado que las ondas que salen fuesen las ondas que entran y viceversa. Esto se mostraría en la figura 4, si las flechas estuvieran en la dirección opuesta.

La matriz "S" nos relaciona los coeficientes de las ondas entrantes con los coeficientes de las ondas que sa

len de la impureza, teniendo como propiedades la de ser simétrica y unitaria entre otras. Es evidente que la matriz "S" de nuestro caso, tiene la propiedad de ser simétrica, demostraremos que tiene algunas otras propiedades de la matriz de dispersión.

Aho: bien, por continuidad tenemos que:

$$\alpha_1 - \beta_1 = \alpha_2 - \beta_2$$

en ambos lados de la impureza, o bien, lo que entra es igual a lo que sale de dicha impureza, así que:

$$|\beta_1|^2 + |\beta_2|^2 = |\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2$$

si aplicamos esto en nuestra ecuación (12) tenemos:

$$(\beta_1^* \ \beta_2^*) \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix} = (\alpha_1^* \ \alpha_2^*) \overline{S^*} S \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} \quad (14)$$

donde $(\beta_1^* \ \beta_2^*)$, $(\alpha_1^* \ \alpha_2^*)$ y $\overline{S^*}$ son las transpuestas conjugadas de las matrices $\begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix}$, $\begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix}$ y S respectivamente, o sea que para que exista continuidad en el flujo se debe cumplir que:

$$\overline{S^*} S = 1 \quad (13b)$$

así que como $S_{11} = S_{22}$ y $S_{12} = S_{21}$ tenemos que:

$$\begin{pmatrix} S_{11}^* & S_{21}^* \\ S_{12}^* & S_{22}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{12} & S_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

osea que:

$$S_{11}^* S_{11} + S_{12}^* S_{12} = 1$$

$$S_{11}^* S_{12} + S_{21}^* S_{22} = 0$$

o lo que es lo mismo, el producto $\overline{S^*}S$ nos da la matriz identidad, por lo tanto la ecuación (14) se cumple. Así las condiciones (13a) y (13b) nos dicen que la matriz "S" tiene las siguientes propiedades: es simétrica y su inversa es igual a su hermítica conjugada ya que sus elementos están sujetos a las condiciones:

$$S_{11}^2 + S_{12}^2 = 1$$

$$S_{11}^* S_{12} + S_{21}^* S_{22} = S_{11} S_{12}^* + S_{21}^* S_{22} = 0$$

recordemos también que, si el producto de dos matrices conmuta y es igual a la unidad, una matriz es inversa de la otra, la matriz "S" tiene todas estas características y por lo tanto, como ya dijimos antes, contiene la dinámica del problema.

I-3 LAS SINGULARIDADES DE LA MATRIZ "S" Y LOS MODOS LOCALIZADOS.

La ecuación (12) representa aquí, una transformación lineal, donde la Matriz "S" tiene toda la información sobre al centro dispersor. Se puede encontrar la relación de dispersión, ω en función del número de onda k , y con ello la frecuencia vibracional del átomo impureza. Ahora bien, si observamos los elementos de la matriz "S", notaremos que ésta puede hacerse singular con sólo hacer el denominador igual a cero, esto es:

$$M'\omega^2 + 2\gamma(e^{ik} - 1) = 0 \quad (15)$$

Quiere decir esto, que las amplitudes de las ondas salientes, β_1 ; β_2 serían infinitas con respecto a las amplitudes α_1 , α_2 de las ondas entrantes a la impureza, lo cual es físicamente inaceptable, de otro modo, para que se obtengan ondas salientes de amplitudes finitas, las amplitudes de las ondas entrantes deberían ser cero, más todavía, si el número de onda k fuera real, querria decir que la impureza es una fuente emisora de ondas cuyas amplitudes son β_1 y β_2 , lo que también físicamente no es aceptable por lo que k debe ser complejo y se describen así ondas atenuadas hacia los lados del átomo impureza colocado en el centro del cristal, figura 5.

Sigamos ahora con el problema de la impureza. Hasta aquí tenemos dos ecuaciones que relacionan a la frecuencia ω , La ecuación (10) y la ecuación (15); Resolviendo simultáneamente éstas ecuaciones para eliminar a ω , encontramos:

$$1 - \frac{M'}{M}(1 - \cos k) - e^{ik} = 0 \quad (16)$$

ahora bien, k debe ser complejo, así que $k = \mu + i\theta$. Sustituyendo -

el valor de k en la ecuación 16 y poniendo a $X=e^{\xi}$, obtenemos la siguiente expresión:

$$X^2 + X\left(2 - \frac{2M}{M'}\right) - \frac{2M}{M'} + 1 = 0 \quad (17)$$

cuyas soluciones nos dan las frecuencias de los modos localizados debido a la impureza. Sus soluciones son:

$$X_1 = \frac{2M}{M'} - 1$$

y

$$X_2 = -1$$

la solución X_2 no da modos localizados, por lo que en este caso sólo existe un modo localizado con frecuencia dada por la solución X_1 .

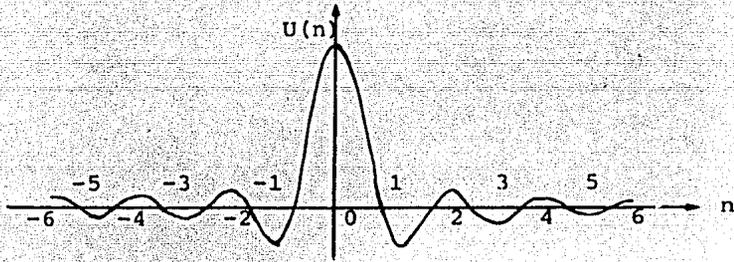


Fig. 5. Se muestran las ondas atenuadas salientes en un cristal con la impureza colocada en el centro del mismo.

La condición de existencia del modo localizado es la siguiente:

En realidad e^{ξ} debe ser mayor que 1, o sea que la solución X_1 de la ecuación (17), debe ser también mayor que 1, esto quiere decir que $M' < M$. Con todo lo dicho anteriormente podemos encontrar la frecuencia del modo localizado, esta frecuencia se encuentra en la banda prohibida del cristal perfecto, es decir, que los modos de vibración con valor de su frecuencia en la banda prohibida se llaman "Modos localizados", así que podemos afirmar que hacer singular a la Matriz "S" implica encontrar la ecuación de los eigenvalores de la frecuencia y de ahí las condiciones de existencia para los modos localiza--

dos.

RESUMEN.- En este capítulo hemos definido la matriz "S" y mostrado algunas de sus propiedades, también calculamos esta matriz en el caso de una imperfección localizada en el centro de un cristal infinito, la imperfección fue descrita por un átomo que tiene masa diferente a los átomos del cristal perfecto. Para encontrar los modos localizados que produce esta impureza se hizo singular la matriz "S" y de ahí se calculó la ecuación de eigenvalores para la frecuencia. También se mostró la condición de existencia para el modo localizado. El método de la Matriz de Dispersión "S", mostrado aquí, lo vamos a extender para calcular los modos localizados asociados a la interfase entre dos cristales monoatómicos semi-infinitos, en el capítulo siguiente.

C A P I T U L O I I

MODOS VIBRACIONALES LOCALIZADOS
EN LA INTERFASE DE DOS CRISTALES.

II-1 ANTECEDENTES.

Después de que Fukuda¹¹ introduce el método de la Matriz de dispersión para resolver el problema de una cadena lineal monoatómica infinita con una impureza en el centro, la Matriz "S" fue usada por Jun-ichi Hori y Takashi Asahi¹⁰ para resolver problemas de superficie con y sin impurezas, este trabajo contempla los siguientes problemas: a) Una cadena unidimensional con una o dos impurezas isotópicas en la superficie, b) Una cadena diatómica lineal con o sin impurezas en la superficie, c) Una cadena bidimensional que en uno de sus extremos está compuesta de impurezas isotópicas de la misma índole, y d) Una cadena bidimensional con una impureza isotópica en la superficie.

Para resolver el problema (a), Hori y Asahi proponen el modelo mostrado en la fig.6, establecen las ecuaciones de movimiento para los átomos N-1 y N. Usando el método de la Matriz "S" encuentran que la relación de dispersión está dada por la ecuación:

$$\omega^2 = \frac{4k}{M} \sin^2 \beta$$

donde según la notación de Hori y Asahi, k es la constante de la fuerza de Hooke, M la masa de los átomos de la cadena y β el número de onda. Suponiendo una solución de la forma:

$$U(n) = I \exp(2i\beta n) + R \exp(-2i\beta n)$$

encuentran la ecuación para la frecuencia de los modos de superficie, ésta es:

$$1+2Q \cosh \epsilon (\cosh \epsilon - \sinh \epsilon) = 0$$

en la que $Q=M'/M-1$, siendo M' la masa de la impureza.

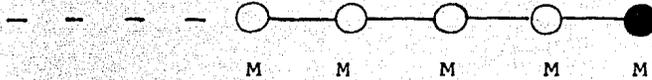


Fig.6 Modelo de una cadena lineal monoatómica con una impureza en la superficie.

Para el problema con dos impurezas en la superficie encuentran la ecuación:

$$-1-16M'M'' \cosh 4\epsilon / M^2 + 4M' \cosh^2 \epsilon (\exp(-2\epsilon) + 2) / M + 4M'' \cosh^2 \epsilon / M - \exp(-2\epsilon) = 0$$

que es la ecuación de eigenfrecuencias para los modos de superficie.

Para resolver el problema (b), proponen el modelo de la fig.7, escriben las ecuaciones de movimiento para los átomos $2n$, $2n-1$, $2n-2$ y por la Matriz "S" obtienen las condiciones para la existencia de los modos de superficie dadas por:

$$1 - \exp(-2i\beta) + 4Q \sin^2 \beta - M_1 \omega^2 (1+2Q)/k = 0$$

donde $Q = \frac{M'-M}{M_2}$, hacen $\beta = \pi + i\epsilon$ y obtienen la ecuación:

$$\{ 1 + \exp(2\epsilon) + 4Q \cosh^2 \epsilon \} / (1+2Q) = (M_1 + M_2) \pm \pm \{ (M_1 + M_2)^2 - (4 \cosh^2 \epsilon) M_1 M_2 \} / M_2$$

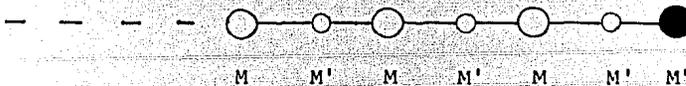


Fig.7 Modelo de una red diatómica con una impureza en la superficie.

Efectúan un análisis sobre las diferentes relaciones entre M_1 y M_2 , obtienen así que los modos de superficie se encuentran en las bandas prohibidas.

Los siguientes problemas (c) y (d) los resuelven también con el método de la Matriz "S" para corroborar sus resultados obtenidos en un trabajo anterior. Debido a que usan también el método de la Matriz de transferencia, hacen una discusión sobre la relación existente entre éstos dos métodos.

Todos los resultados de Hori y Asahi están de acuerdo con lo ya planteado por Saxon y Hutner en 1949, sin embargo hasta la fecha, no ha sido resuelto el problema de la interfase, por el método de la Matriz "S", de modo que abordaremos esto a partir del próximo inciso y durante todo el siguiente capítulo.

II-2 DOS CRISTALES MONOATOMICOS SEMI-INFINITOS.

Resolveremos ahora el problema de los modos de interfase entre dos Cristales Monoatómicos Unidimensionales-Semi-infinitos con Interacción a Primeros Vecinos, utilizando para ello la técnica de la Matriz de Dispersión "S", tratando de alcanzar los objetivos siguientes: a) Obtener las condiciones de existencia de los modos localizados en la interfase. y b) Obtener la frecuencia de los modos localizados. Para ello haremos las siguientes proposiciones:

EL MODELO.- Proponemos dos cristales monoatómicos semi-infinitos, que estén tan cerca uno del otro, que exista una interacción entre ellos. Para comprender mejor a nuestro modelo, refirámonos a la fig. 8. Esquematicemos hacia la izquierda, a partir de la posición -1, a uno de los cristales, hacia la derecha a partir de la posición +1, el otro cristal. Aquí, todos los átomos tienen la misma masa "m". Los dos cristales tienen el mismo parámetro de red "a" y la misma constante de interacción entre sus átomos " γ ", excepto en la interfase en donde la distancia entre los átomos -1 y 1 es de $2a$; La interacción la caracterizamos por " γ' " y la interacción a segundos vecinos dentro del cristal por " γ'' ".

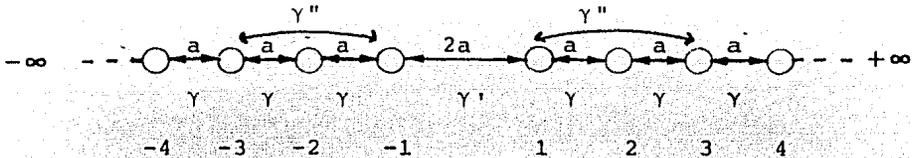


Fig.8 Dos cristales monoatómicos semi-infinitos con interfase entre los átomos -1 y 1.

Suponemos que la interacción a segundos vecinos dentro de los cristales, es despreciable con respecto a la interacción a primeros vecinos, por lo que las ecuaciones para el cristal infinito, de movimiento para los átomos -1 y 1, deben ser:

$$m\omega^2 U(n) + \gamma [U(n-1) + U(n+1) - 2U(n)] = 0 \quad \forall n \neq \pm 1, 0 \quad (18)$$

a la que llamamos ecuación del cristal infinito. Para el átomo -1 la ecuación es:

$$m\omega^2 U(-1) + \gamma [U(1) - U(-1)] - \gamma [U(-1) - U(-2)] = 0 \quad (19)$$

para el átomo 1:

$$m\omega^2 U(1) + \gamma [U(2) - U(1)] - \gamma' [U(1) - U(-1)] = 0 \quad (20)$$

Como hemos definido a nuestro problema y refiriendonos a la fig 9, en la región II, no existe elemento alguno, excepto la interacción γ' , que está ya contenida en las ecuaciones de los átomos -1 y 1.

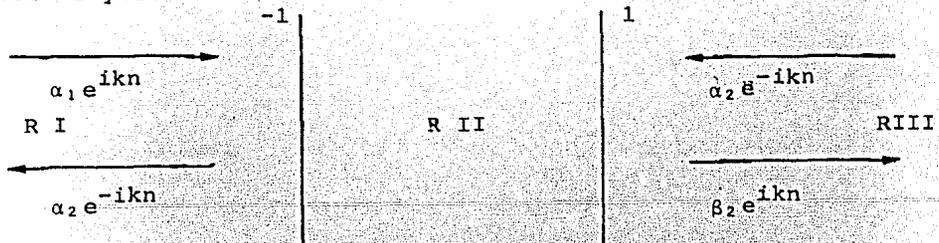


Fig. 9 Ondas planas de entrada y salida de la interfase de dos cristales.

Se propone la solución general como:

$$U(n) = \begin{cases} \alpha_1 e^{ikn} + \beta_1 e^{-ikn} & \text{para } n \leq -1 \text{ Región I} \\ \alpha_2 e^{-ikn} + \beta_2 e^{ikn} & \text{para } n \geq 1 \text{ Región III} \end{cases} \quad (20a)$$

Debemos decir aquí que la ecuación (18), es nuestra única ecuación de diferencias, las ecuaciones (19) y (20) son las condiciones de frontera del problema.

Si sustituimos cualquiera de las ecuaciones (20a) en la ecuación (18) obtenemos:

$$m \omega^2 = 2 \gamma (1 - \cos k) \quad (20b)$$

Por lo que expresamos anteriormente sobre la región II, no existe ecuación de continuidad en ella, así que sustituyendo las soluciones (20a) en las ecuaciones (19) y (20) tenemos respectivamente:

$$(m \omega^2 - \gamma' - \gamma) (\alpha_1 e^{-ik} + \beta_1 e^{ik}) + \gamma' (\alpha_2 e^{-ik} + \beta_2 e^{ik}) + \gamma (\alpha_1 e^{-2ik} + \beta_1 e^{2ik}) = 0 \quad (21)$$

$$(m \omega^2 - \gamma' - \gamma) (\alpha_2 e^{-ik} + \beta_2 e^{ik}) + \gamma (\alpha_2 e^{-2ik} + \beta_2 e^{2ik}) + \gamma' (\alpha_1 e^{-ik} + \beta_1 e^{ik}) = 0 \quad (22)$$

Agrupando los términos que contengan $\alpha_1, \alpha_2, \beta_1, \beta_2$ en las ecuaciones anteriores y resolviendo simultáneamente para obtener β_1 y β_2 tenemos:

$$\beta_1 = -\alpha_1 \left\{ \frac{[(m \omega^2 - \gamma - \gamma') + \gamma e^{ik}] - [(m \omega^2 - \gamma - \gamma') + \gamma e^{-ik}] - \gamma'^2}{e^{2ik} [(m \omega^2 - \gamma - \gamma') + \gamma e^{ik}]^2 - e^{-2ik} \gamma'^2} \right\} - \alpha_2 \left\{ \frac{[(m \omega^2 - \gamma - \gamma') + \gamma e^{ik}] - [(m \omega^2 - \gamma - \gamma') + \gamma e^{-ik}]}{e^{2ik} [(m \omega^2 - \gamma - \gamma') + \gamma e^{ik}]^2 - e^{-2ik} \gamma'^2} \right\} \quad (23)$$

$$\beta_2 = -\alpha_1 \left\{ \frac{-2i \gamma \gamma' \operatorname{sen} k}{\gamma'^2 e^{2ik} - e^{-2ik} [(m \omega^2 - \gamma - \gamma') + \gamma e^{ik}]^2} \right\} - \alpha_2 \left\{ \frac{\gamma'^2 - (m \omega^2 - \gamma - \gamma')^2 - 2\gamma (m \omega^2 - \gamma - \gamma') \cos k - \gamma^2}{e^{2ik} \gamma'^2 - e^{-2ik} [(m \omega^2 - \gamma - \gamma') + \gamma e^{ik}]^2} \right\} \quad (24)$$

la ecuación (24) tiene ya desarrollados los numeradores mientras que la ecuación (23) no; Si los desarrollamos, observamos que - hasta aquí tenemos β_1 y β_2 como funciones de α_1 y α_2 . Expresando éstos resultados en términos de matrices, se tiene que:

$$\begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix}$$

donde "S" es la matriz formada por los coeficientes de α_1 y α_2 - por lo tanto podemos escribir:

$$S = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \quad (25)$$

donde los elementos de la matriz "S" están dados por:

$$S_{11} = S_{22} = - \frac{(m\omega^2 - \gamma - \gamma') + 2\gamma(m\omega^2 - \gamma - \gamma') \cos k + \gamma^2 - \gamma'^2}{e^{2ik} \{ (m\omega^2 - \gamma - \gamma') + e^{ik} \gamma \}^2 - e^{2ik} \gamma'^2}$$

$$S_{12} = S_{21} = - \frac{2i\gamma\gamma' \sin k}{e^{2ik} \{ (m\omega^2 - \gamma - \gamma') + e^{ik} \gamma \}^2 - e^{2ik} \gamma'^2}$$

Al escribir la matriz "S" nos damos cuenta inmediatamente que - ésta es simétrica, además el denominador en todos sus elementos es el mismo, de modo que basta hacer a éste igual a cero, para que la matriz se haga singular, o bien que la ecuación de eigen valores es:

$$e^{2ik} \{ (m\omega^2 - \gamma - \gamma') + e^{ik} \gamma \}^2 - e^{2ik} \gamma'^2 = 0 \quad (26)$$

y que podemos escribir como:

$$m\omega^2 - \gamma - \gamma' + e^{ik} \gamma = \pm \gamma' \quad (27)$$

Existen dos posibilidades para la ecuación -- (27), ya sea que seleccionemos el signo (+), o el signo (-). Si seleccionamos el signo (-), nos dá:

$$1 - \frac{m}{\gamma} \omega^2 - e^{ik} = 0 \quad (28)$$

En ésta ecuación aparece sólo la interacción entre los átomos - del cristal "γ", lo cual quiere decir que la ecuación (28) no - da respuesta al problema de la interfase, ya que describe un -- cristal, en otras palabras, la ecuación (28) nos da los modos - de superficie, una de las soluciones del problema.

Si escogemos el signo (+) en la ecuación (27) nos dice que:

$$1 - \frac{m}{\gamma} \omega^2 - e^{ik} + \frac{2\gamma'}{\gamma} = 0 \quad (29)$$

es la ecuación que representa el caso general, es decir, contiene a la superficie y a la interfase, ésta pues, resuelve nuestro problema de interfase. Sin embargo, desde el punto de vista matemático, la solución más general debe contener al plano complejo, por lo que "k" debiera ser imaginario puro o complejo. Ahora, desde el punto de vista físico, si "k" es imaginario puro, las soluciones se expresarían como:

$$U(n) = \begin{cases} \alpha_1 e^{-\xi n} + \beta_1 e^{\xi n} & \text{para } n \leq -1 \\ \alpha_2 e^{\xi n} + \beta_2 e^{-\xi n} & \text{para } n \geq 1 \end{cases}$$

que con $k=i\xi$ para $n \leq -1$ y en el átomo -1 tenemos:

$$U(-1) = \alpha_1 e^{\xi} + \beta_1 e^{-\xi}$$

en el átomo 1, tenemos:

$$U(1) = \alpha_2 e^{\xi} + \beta_2 e^{-\xi}$$

estas ecuaciones representan exponenciales que crecen o decrecen como se muestra en la figura 10, y que dice lo mismo que hacer la matriz "S" singular, así que "k" debe ser complejo.

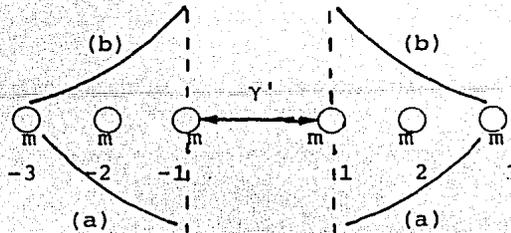


Fig.10. Las aes, muestran las exponenciales que crecen hacia el interior del cristal, cuando "k" es imaginario puro. Las bes, las exponenciales que decrecen hacia el interior del cristal.

Analicemos la ecuación (28), poniendo a "k" como un complejo:

$$k = \mu + i\xi$$

con μ y ξ reales, la ecuación nos queda como:

$$1 - \frac{m}{\gamma} \omega^2 - e^{i\mu} e^{-\xi} = 0$$

Poniendo las expresiones con las exponenciales en términos de se

nos y cosenos y separando las partes real e imaginaria, tenemos

$$\text{Parte real: } 1 - \frac{m}{\gamma} \omega^2 - \cos \mu e^{-\xi} = 0 \quad (30)$$

Parte imaginaria:

$$i \operatorname{sen} \mu e^{-\xi} = 0 \quad (31)$$

La única posibilidad de que se cumpla la ecuación (31) es que $\operatorname{sen} \mu = 0$, por lo tanto $\mu = n\pi$ siendo $n = -\infty \dots 0 \dots +\infty$. Sustituyendo el valor de μ en la ecuación (30) obtenemos:

$$1 - \frac{m}{\gamma} \omega^2 - (-1)^n e^{-\xi} = 0$$

De aquí tenemos dos valores para la frecuencia ω cuando "n" sea par e impar:

$$\omega^2 - \frac{\gamma}{m} e^{-\xi} - \frac{\gamma}{m} = 0 \quad \text{para } n \text{ impar} \quad (31a)$$

$$\omega^2 + \frac{\gamma}{m} e^{-\xi} - \frac{\gamma}{m} = 0 \quad \text{para } n \text{ par}$$

Por otro lado, de la ecuación (18) con k complejo obtenemos:

$$\omega^2 - \frac{\gamma}{m} (e^{\xi} + e^{-\xi}) - \frac{2\gamma}{m} = 0 \quad \text{para } n \text{ impar} \quad (31b)$$

$$\omega^2 + \frac{\gamma}{m} (e^{\xi} + e^{-\xi}) - \frac{2\gamma}{m} = 0 \quad \text{para } n \text{ par}$$

Resolviendo simultáneamente las ecuaciones (31a) y (31b), para n-impar y par n-par, se obtiene: $e^{\xi} = -1$, $e^{\xi} = 1$ respectivamente. Finalmente $\omega = 0$ para ambos casos, por lo que se deduce que no existen modos localizados de superficie.

Analicemos ahora la ecuación (29), con "k" como un complejo, combinandola con la ecuación (16), de éste modo se obtiene que:

$$2(\cos \mu \cos i\xi - \operatorname{sen} \mu \operatorname{sen} i\xi) - (\cos \mu + i \operatorname{sen} \xi) e^{-\xi} + \frac{2\gamma'}{m} - 1 = 0 \quad (32)$$

Separandola en sus partes real e imaginaria:

$$2\cos \mu \cosh \xi - \cos \mu e^{-\xi} + \frac{2\gamma'}{m} - 1 = 0 \quad (33)$$

$$i \operatorname{sen} \mu (2\operatorname{senh} \xi + e^{-\xi}) = 0 \quad (34)$$

Otra vez, la única posibilidad de que la ecuación (34) se satisfaga, es que el $\operatorname{sen} \mu = 0$, de donde $\mu = n\pi$; $n = -\infty \dots 0 \dots \infty$. Sustituyendo el valor de μ en la ecuación (34), se obtiene:

$$e^{\xi} = \frac{2\gamma'}{\gamma} - 1 \quad \text{para } n \text{ impar} \quad (34a)$$

$$e^{\xi} = 1 - \frac{2\gamma'}{\gamma} \quad \text{para } n \text{ par} \quad (34a')$$

De aquí $\xi > 0$ y $\frac{2\gamma'}{\gamma} - 1 > 1$ por lo tanto $\gamma' > \gamma$ ambas deben ser positivas o negativas para n impar, o en caso de que n sea par la ecuación es $1 - \frac{2\gamma'}{\gamma} > 1$ por lo que γ' y γ deben ser una positiva y la otra negativa. Obtengamos ahora la frecuencia para n impar con la ayuda de las ecuaciones (31b); Hagamos lo mismo para n par, entonces tenemos:

$$\omega^2 = \frac{4\gamma}{m} \left\{ \frac{1}{\frac{\gamma}{\gamma'} \left(2 - \frac{\gamma}{\gamma'} \right)} \right\} \quad (35a)$$

$$\omega^2 = -\frac{4\gamma}{m} \left\{ \frac{1}{\frac{\gamma}{\gamma'} \left(\frac{\gamma}{\gamma'} - 2 \right)} \right\} \quad (35b)$$

Estas dos ecuaciones dan la misma frecuencia en valor absoluto, es decir, sólo existe una frecuencia porque la ecuación (35b) es menor que cero, por lo que dadas γ y γ' existe un modo localizado con frecuencia ω . Hagamos ahora una gráfica para las frecuencias con γ y γ' dadas por las condiciones (34a) es decir, siempre que la relación de gamma prima entre gamma sea mayor que uno, existe la interfase, de ésta manera tendremos un modo localizado que se debe a la interfase con una frecuencia dada por la ecuación (35a), además tendremos un solo modo para n impar, ya que para n par la condición de existencia no se cumple, además porque hemos supuesto que el movimiento de los átomos es armónico simple, γ y γ' solo pueden ser positivas.

Calculemos la frecuencia de los modos localizados en tres casos diferentes: para cuando $\gamma/\gamma' = \frac{1}{2}$, $\gamma/\gamma' = 1/3$ $\gamma/\gamma' = 1/4$. En la figura 11 mostramos la frecuencia de los modos localizados para la interfase, en los casos mencionados y hemos puesto a $\omega_0^2 = 4\gamma/m$. En esta gráfica k es el número de onda, se representa la rama acústica y los puntos marcados con ω_1^2 , ω_2^2 , ω_3^2 son las frecuencias de los modos.

En los casos analizados la frecuencia de los modos localizados se encuentra siempre por arriba de la banda acústica, teniendo los valores siguientes: $\omega_1^2 = 4/3\omega_0^2$; $\omega_2^2 = 9/5\omega_0^2$; $\omega_3^2 = 16/7\omega_0^2$. Esto está de acuerdo con que la frecuencia de los mo

dos localizados se encuentre en la región de frecuencias prohibidas.

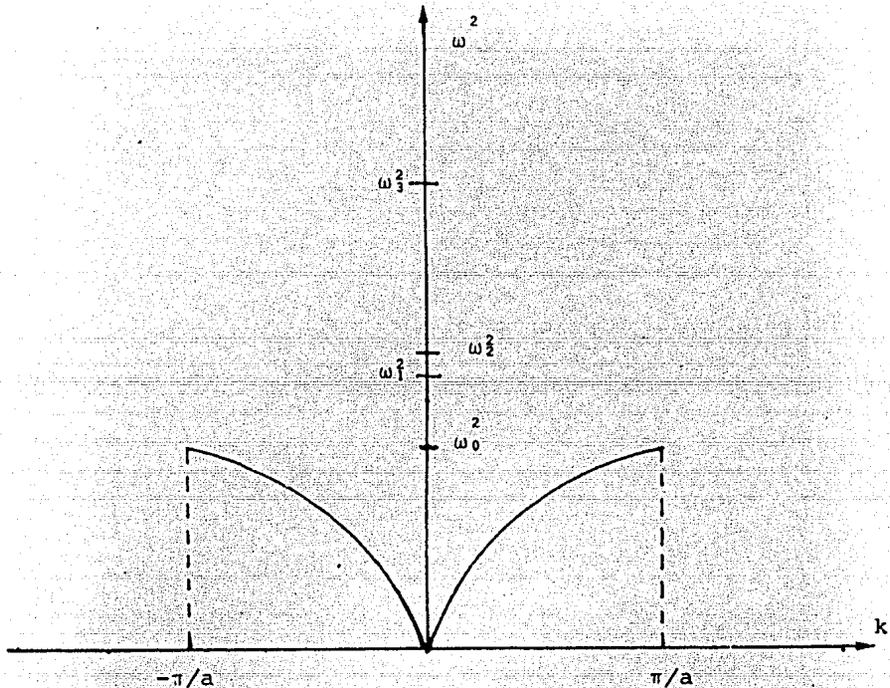


Fig.11. Se muestran las frecuencias de los modos localizados cuando se dan γ y γ' .

Como ya dijimos anteriormente, tenemos dos condiciones de existencia de modos localizados, a saber:

$$e^{\xi} = 1 - \frac{2\gamma'}{\gamma} \quad \text{para toda } n \text{ par.}$$

$$e^{\xi} = \frac{2\gamma'}{\gamma} - 1 \quad \text{para toda } n \text{ impar.}$$

Como hemos supuesto que los átomos vibran como osciladores armónicos, la forma del potencial no permite más que γ y γ' sean ambas positivas, por lo que sólo existe modo localizado para n impar, debido a que la condición para n par no se cumple. La frecuencia de estos modos localizados está dada por la ecuación :

$$\omega^2 = \frac{4\gamma}{m} \left(\frac{1}{\frac{\gamma'}{\gamma} \left(2 - \frac{\gamma'}{\gamma} \right)} \right)$$

Con todo ésto ya podemos encontrar la forma de los modos localizados, por ejemplo para los casos en que $\gamma'/\gamma = 2$, $\gamma'/\gamma = 3$, y $\gamma'/\gamma = 4$, a los que llamaremos casos 1, 2, 3 respectivamente, la forma de los modos está dada por la ecuación:

$$U(n) = Ae^{i\theta n} + Be^{-i\theta n} \quad \forall n = -\infty \dots \infty \quad (36)$$

Sin embargo hasta aquí, las constantes A y B no han sido determinadas, para ésto usaremos la ecuación anterior con $\theta = \mu + i\xi$ donde $\mu = n\pi$ de lo que resulta:

$$U(n) = \begin{cases} Be^{n\xi}(-1)^n & \forall n \leq -1 \\ Ae^{-n\xi}(-1)^n & \forall n \geq 1 \end{cases} \quad (37)$$

ahora bien, usando la ecuación de movimiento para el átomo 1, - ecuación (18), que es una condición de frontera del problema, y sustituyendo en ésta las ecuaciones (37), el valor de ω dado por la ecuación (36) obtenemos:

$$\frac{B}{A} = -1 \quad \text{o bien} \quad B = -A$$

ésto quiere decir que en el centro dispersor, la interfase, las amplitudes de las ondas entrantes son iguales en magnitud pero de sentido contrario a las amplitudes de las ondas salientes, - podemos normalizar al valor $A=1$, por lo que las ecuaciones (27) pueden escribirse como:

$$U(n) = \begin{cases} e^{n\xi}(-1)^n & \forall n \leq -1 \\ e^{-n\xi}(-1)^n & \forall n \geq 1 \end{cases} \quad (37a)$$

ya que n representa el número de átomos, tendremos el valor del desplazamiento de cada átomo si en las ecuaciones (37a) sustituimos el número de átomo y el valor obtenido para e^ξ a partir del valor escogido para los parámetros γ y γ' .

Con objeto de mostrar las formas de los modos localizados, analizaremos los casos 1, 2, y 3 por separado, así tenemos:

Caso 1) Después de poner el valor de e^ξ y el valor para n en las ecuaciones (37a), obtenemos los desplazamientos que sufren los átomos alrededor de su posición de equilibrio mostrados en las tablas 1, y cuyas gráficas se muestran-

en la figura 12. En la gráfica podemos ver que los modos localizados están en la región entre los átomos 1 y -1, que las ondas se amortiguan hacia adentro de los cristales y que aproximadamente en el átomo número 6 se ha amortiguado totalmente.

<u>n</u>	<u>U(n)</u>	<u>-n</u>	<u>U(n)</u>
1	0.33	1	-0.33
2	-0.11	2	0.11
3	0.037	3	-0.037
4	-0.0123	4	0.0123
5	0.0041	5	-0.0041
6	-0.0013	6	0.0013
7	0.00045	7	-0.00045
8	-0.00015	8	0.00015
9	0.00005	9	-0.00005
10	-0.000016	10	0.000016

Tablas 1) Se muestran los valores de los desplazamientos para los átomos del cristal derecho (n) y del cristal izquierdo (-n).

Caso 2) Refiriéndonos a la figura 11, observamos que la frecuencia del modo localizado es mayor en este caso que en el caso anterior, pero ésta es la única diferencia, porque las ecuaciones que nos dan las formas de los modos son las mismas, así tenemos que las ecuaciones (37a) con $\gamma'/\gamma=3$, que da $e^{\xi}=5$, de donde encontramos la forma del modo localizado que se muestra en la figura 13, cuyos valores de los desplazamientos de los átomos alrededor de su posición de equilibrio, se encuentran en las tablas 2.

<u>n</u>	<u>U(n)</u>	<u>-n</u>	<u>U(n)</u>
1	0.2	1	-0.2
2	-0.04	2	0.04
3	0.008	3	-0.008
4	-0.0016	4	0.0016
5	0.0003	5	-0.0003
6	-0.00006	6	0.00006
7	0.000012	7	-0.000012
8	-0.000002	8	0.000002
9	0.0000005	9	-0.0000005
10	-0.0000001	10	0.0000001

Tablas 2) Se muestran los valores de los desplazamientos para los átomos del cristal derecho (n) y del cristal izquierdo (-n).

Nuevamente observamos, como en el caso anterior, que el modo está localizado entre los átomos -1 y 1, que se amortigua hacia adentro de los cristales, pero ahora en el -

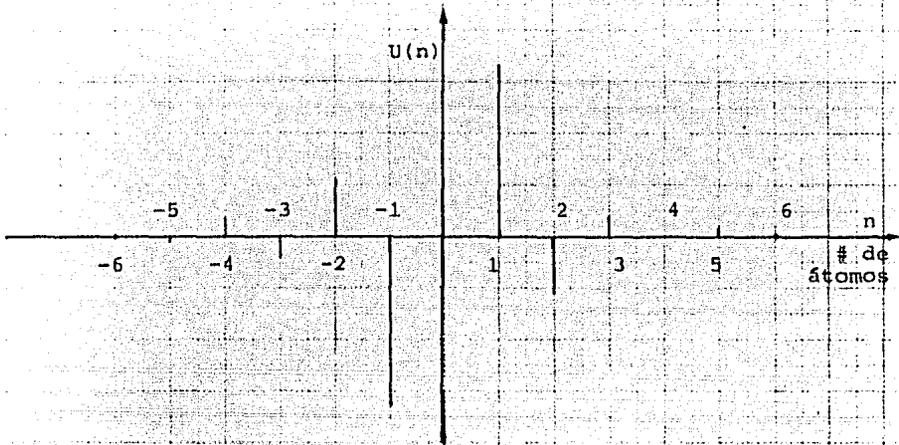


Fig. 12. Representa los desplazamientos de los átomos alrededor de su posición de equilibrio para el caso $1, \gamma'/\gamma$.

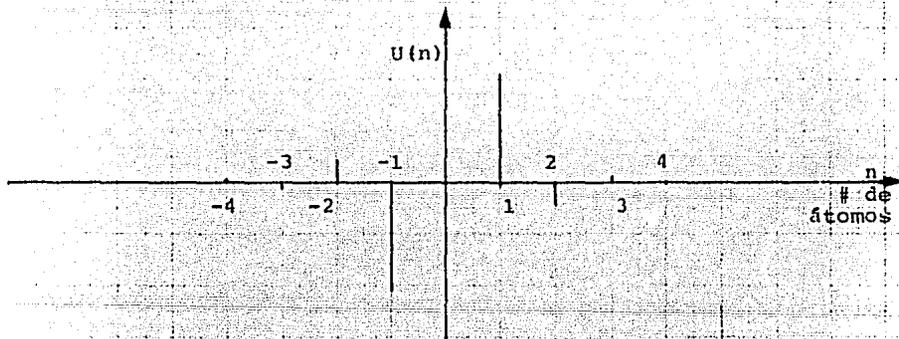


Fig. 13. Representa los desplazamientos de los átomos alrededor de su posición de equilibrio para el caso $2, \gamma'/\gamma$.

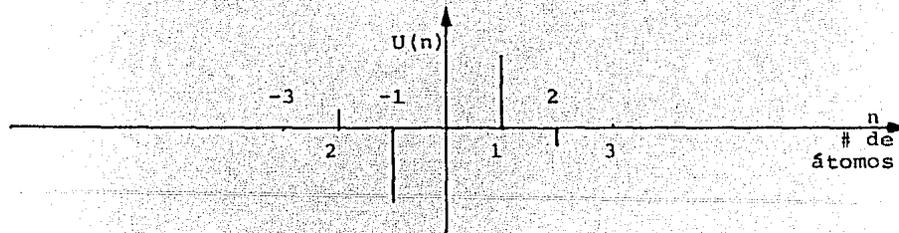


Fig. 14. Representa los desplazamientos de los átomos alrededor de su posición de equilibrio para el caso $3, \gamma'/\gamma$.

átomo número 4, se ha amortiguado casi totalmente.

Caso 3) Mientras más grande sea la relación de γ'/γ , mayor será la frecuencia del modo localizado y por lo tanto debemos esperar que las ondas hacia adentro del cristal se amortigüen más rápidamente, esto lo corroboran los valores puestos en las tablas 3, que fueron obtenidos con $\gamma'/\gamma=4$, que da $e^\xi=7$. Podemos decir aquí, figura 14, que en el átomo número 3 la onda está amortiguada casi totalmente.

n	U(n)	-n	U(n)
1	0.14	1	-0.14
2	-0.02	2	0.02
3	0.0029	3	-0.0029
4	-0.0004	4	0.0004
5	0.00005	5	-0.00005

Tablas 3) Se muestran los desplazamientos de los átomos del cristal derecho (n) y del cristal izquierdo (-n)

Refiramonos ahora a la figura 11. Teniendo los valores de ω_1^2 , ω_2^2 y ω_3^2 que corresponden a los modos localizados para los casos analizados; obtengamos el valor del número de onda que corresponda a los valores de ω . Para esto usaremos la relación de dispersión para el cristal infinito, ecuación (10) o bien la ecuación (6). Observemos que para encontrar la frecuencia del modo localizado hicimos a "k" compleja, así que la relación de dispersión nos queda como:

$$m \omega^2 = 2\gamma [1 - \cos(\mu + i\xi)]$$

sustituyendo valores y resolviendo para cada caso, obtenemos:

Caso 1) Se obtiene de la ecuación (34):

$$a) \mu = n\pi$$

donde n es impar ya que los modos localizados no existen para cuando n es par.

b) De la relación de dispersión tenemos:

$$\cosh \xi = 1.666 \quad \xi = 1.1$$

finalmente:

$$c) k = \pi + ie^{1.1} = \pi + i 2.9$$

Caso 2)

$$a) \mu = n\pi$$

$$b) \cosh \xi = 2.6 \quad \xi = 1.61$$

$$c) k = \pi + ie^{1.61} = \pi + i5$$

Caso 3)

$$a) \mu = n\pi$$

$$b) \cosh \xi = 3.571 \quad \xi = 1.95$$

$$c) k = \pi + ie^{1.95} = \pi + i6.99$$

En la gráfica de la figura 14 bis, se muestra a la frecuencia ω como función del número de onda k .

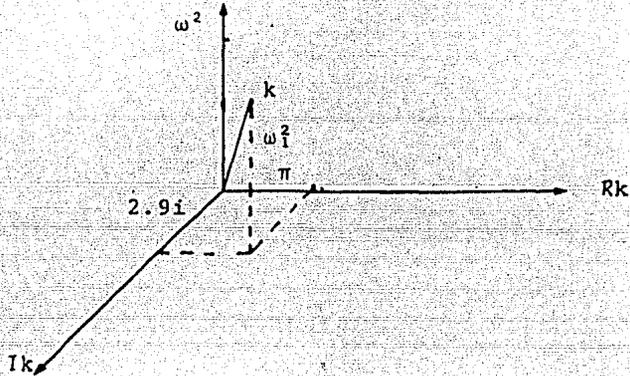


Fig. 14 bis. Se grafica la frecuencia ω , como función del número de onda k .

RESUMEN.- En este capítulo nos hemos ocupado del problema de la interfase entre dos cristales monoatómicos - semi-infinitos, proponiendo un modelo particular y resolviéndolo mediante la técnica de la matriz de dispersión "S", haciendo singular ésta matriz encontramos la ecuación de los eigenvalores de la frecuencia y a partir de ésta, las condiciones de existencia de los modos localizados y la forma de dichos modos.- Escogimos tres casos particulares para los cuales la relación de γ'/γ tiene cierto valor, siendo representada la interfase con γ' . En los tres casos analizados se encontró que la frecuencia de los modos localizados está en la región de las frecuencias prohibidas, que los átomos vibran con la misma frecuencia pero con amplitud diferente, siendo el movimiento de mayor amplitud en los átomos -1 y 1, alternándose los átomos en su movimiento y amortiguándose éste hacia el interior del cristal. Finalmente se encontró el número de onda correspondiente para la frecuencia ω en cada caso.

C A P I T U L O I I I

MODOS LOCALIZADOS EN LA INTERFASE
CON IMPUREZAS.

III-1 IMPUREZAS ISOTOPICAS

La información obtenida en el capítulo anterior al resolver el problema sencillo de la interfase nos dió la oportunidad de decir cuantos modos localizados existen, cual es su frecuencia y que forma tienen. Si complicamos nuestro modelo, digamos que además de la interfase, existen impurezas en las orillas de los cristales, y para que siga siendo sencillo, las impurezas sean iguales, ¿Cuáles serán las complicaciones que tendremos para obtener una información semejante a la del problema anterior?, sí es sencillo alcanzar ésta información, ¿Será más amplia?, ¿Tendremos mejor comprensión de lo que sucede en los cristales?, ¿Será mejor éste modelo?. Contestar estas preguntas de manera satisfactoria, nos llevaría a plantear que éste es un buen camino para entender lo que sucede en los cristales reales.

El nuevo modelo es muy parecido al anterior - éste se diferencia esencialmente, en que las masas impurezas están representadas por "M" y son precisamente los átomos colocados en -1 y 1, figura 15, todas las demás características de los cristales permanecen invariantes, por lo que el problema es semejante al del capítulo anterior. Debemos tener en cuenta, que tenemos la existencia de una nueva condición de frontera en los átomos -1 y 1, cosa ésta, que debe complicar la resolución del problema y sobre la que debemos obtener información nueva.

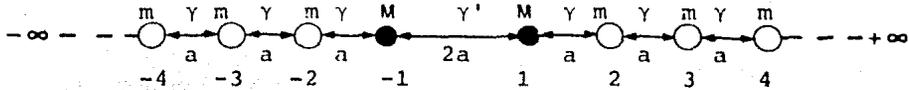


Fig. 15. Dos cristales semi-infinitos monoatómicos con impurezas en las orillas y con interfase entre los átomos -1 y 1.

Para resolver el problema, plantearemos las siguientes ecuaciones:

$$m\omega^2 U(n) + \gamma \left[U(n+1) + U(n-1) - 2U(n) \right] = 0 \quad (38)$$

ecuación del cristal infinito para toda $n \neq$ de 1. Las ecuaciones para los átomos -1 y 1 son:

$$(M\omega^2 - \gamma - \gamma')U(-1) + \gamma U(-2) + \gamma' U(1) = 0 \quad (39)$$

$$(M\omega^2 - \gamma - \gamma')U(1) + \gamma U(2) + \gamma' U(-1) = 0 \quad (40)$$

Otra vez existen tres regiones: RI a la izquierda del átomo -1, R II entre los átomos -1 y 1 y R III a la derecha del átomo 1.

Proponemos la solución:

$$U(n) = \begin{cases} \alpha_1 e^{ikn} + \beta_2 e^{-ikn} & \forall n \leq -1 \\ \alpha_2 e^{-ikn} + \beta_2 e^{ikn} & \forall n \geq 1 \end{cases} \quad (41)$$

Sustituyendo una de éstas soluciones en la ecuación (38) obtenemos:

$$m\omega^2 = 2\gamma(1 - \cos k) \quad (42)$$

Ahora sustituyendo las ecuaciones (41) en las ecuaciones (39) y (40) obtenemos:

$$\beta_1 e^{ik} \left[(M\omega^2 - \gamma - \gamma') + \gamma e^{ik} \right] + \beta_2 e^{ik\gamma'} + \alpha_1 e^{-ik} \left[(M\omega^2 - \gamma - \gamma') + \gamma e^{-ik} \right] + \alpha_2 e^{-ik\gamma'} = 0 \quad (43)$$

$$\beta_1 e^{ik\gamma'} + \beta_2 e^{ik} \left[(M\omega^2 - \gamma - \gamma') + \gamma e^{ik} \right] + \alpha_1 e^{-ik\gamma'} + \alpha_2 e^{ik} \left[(M\omega^2 - \gamma - \gamma') + \gamma e^{ik} \right] = 0 \quad (44)$$

Resolviendo simultaneamente las ecuaciones(43) y (44) Obtenemos:

$$\beta_1 = -\alpha_1 \left\{ \frac{(M\omega^2 - \gamma - \gamma' + \gamma e^{ik})(M\omega^2 - \gamma - \gamma' + \gamma e^{-ik}) - \gamma'^2}{e^{2ik} [(M\omega^2 - \gamma - \gamma' + \gamma e^{ik})^2] - \gamma'^2} \right\} -$$

$$-\alpha_2 \left\{ \frac{2\gamma\gamma' \text{isen } k}{e^{2ik} [(M\omega^2 - \gamma - \gamma' + \gamma e^{ik})^2] - \gamma'^2} \right\}$$

$$\beta_2 = -\alpha_1 \left\{ \frac{-2\gamma\gamma' \text{isen } k}{e^{2ik} [\gamma'^2 - (M\omega^2 - \gamma - \gamma' + \gamma e^{ik})^2]} \right\} -$$

$$-\alpha_2 \left\{ \frac{\gamma'^2 - (M\omega^2 - \gamma - \gamma' + \gamma e^{-ik})(M\omega^2 - \gamma - \gamma' + \gamma e^{ik})}{e^{2ik} [\gamma'^2 - (M\omega^2 - \gamma - \gamma' + \gamma e^{ik})^2]} \right\}$$

Poniendo éstos resultados en términos de matrices, tenemos:

$$S = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix}$$

cuyos elementos son:

$$S_{11} = S_{22} = - \frac{(M\omega^2 - \gamma - \gamma' + \gamma e^{ik})(M\omega^2 - \gamma - \gamma' + \gamma e^{-ik}) - \gamma'^2}{e^{2ik} [(M\omega^2 - \gamma - \gamma' + \gamma e^{ik})^2] - \gamma'^2}$$

$$S_{21} = S_{12} = - \frac{2i\gamma\gamma' \text{sen } k}{e^{2ik} [(M\omega^2 - \gamma - \gamma' + \gamma e^{ik})^2] - \gamma'^2}$$

De aquí se obtiene la ecuación de eigenvalores, dada por:

$$M\omega^2 - \gamma - \gamma' + \gamma e^{ik} = \pm \gamma' \quad (45)$$

De manera semejante al problema anterior, analizaremos ésta ecuación escogiendo primero el signo positivo y después el signo negativo. En otras palabras, el signo positivo en la ecuación (45) nos da la posibilidad de analizar la interfase γ y la impureza de masa "M". La ecuación (45) con el signo negativo contiene sólo los modos debidos a las impurezas.

Seleccionemos el signo positivo, así la ecuación (45) nos queda como:

$$- \frac{2\gamma'}{\gamma} - 1 + \frac{M}{\gamma} \omega^2 + e^{ik} = 0 \quad (46)$$

El caso más general, es aquel en el que "k" es un número complejo, de modo que la ecuación (46) con $k = \mu + i\xi$ tiene sus partes real e imaginaria dadas por:

$$-\frac{M}{Y} \omega^2 - \cos \mu e^{-\xi} + 1 = 0 \quad (47)$$

$$\text{isen} \mu e^{-\xi} = 0 \quad (48)$$

La parte imaginaria nos da el valor para μ , como en el caso anterior, $\mu = n\pi$ donde $n = -\infty \dots \dots \infty$, números enteros. Sustituyendo - éste valor en la parte real y resolviendo para n par e impar tenemos:

$$e^{-\xi} - \frac{M}{Y} \omega^2 + 1 = 0 \quad \text{para n impar}$$

$$-e^{-\xi} - \frac{M}{Y} \omega^2 + 1 = 0 \quad \text{para n par}$$

o bien:

$$\omega^2 - \frac{Y}{M} e^{-\xi} - \frac{Y}{M} = 0 \quad (49)$$

$$\omega^2 + \frac{Y}{M} e^{-\xi} - \frac{Y}{M} = 0 \quad (50)$$

Por otro lado, de la ecuación para el cristal infinito, ecuación (38), con k complejo obtenemos que:

$$\omega^2 - \frac{Y}{m} (e^{\xi} + e^{-\xi}) - \frac{2Y}{m} = 0 \quad \text{para n impar} \quad (51)$$

$$\omega^2 + \frac{Y}{m} (e^{\xi} + e^{-\xi}) - \frac{2Y}{m} = 0 \quad \text{para n par} \quad (52)$$

Resolvamos simultáneamente éstas ecuaciones para n par y n impar pongamos $e^{\xi} = X$, así tenemos las ecuaciones siguientes:

$$X^2 + X \left[-\frac{m}{M} \left(1 + \frac{2Y'}{Y} \right) + 2 \right] - \frac{m}{M} + 1 = 0$$

$$X^2 + X \left[\frac{m}{M} \left(\frac{2Y'}{Y} + 1 \right) - 2 \right] - \frac{m}{M} + 1 = 0$$

Definamos ahora, los parámetros $\rho = \frac{Y'}{Y}$, $\eta = \frac{m}{M}$ de modo que las ecuaciones anteriores nos quedan como:

$$X^2 + X \left[-\eta(1+2\rho) + 2 \right] - \eta + 1 = 0 \quad \text{para n impar} \quad (53)$$

$$x^2 + x \left[\eta(2\rho + 1) - 2 \right] - \eta + 1 = 0 \quad \text{para } n \text{ par} \quad (54)$$

Las raíces de éstas ecuaciones nos dan las condiciones de existencia de los modos localizados, así que tendremos cuatro condiciones de existencia: dos para cuando n sea impar y dos para cuando n sea par. La ecuación (53) representa e^ξ , que como sabemos debe ser mayor que uno. En otras palabras, las raíces de la ecuación (53) con la condición de que deben ser mayores que unos dan:

$$n(1 + \rho) > 2 \quad (55)$$

$$\left[-\eta(1 + 2\rho) + 2 \right]^2 - 4\eta\rho < -4 \quad (56)$$

que son las condiciones de existencia de modos localizados, la condición expresada por la ecuación (55) se cumple cuando η o ρ o ambas son mayores que uno, o lo que es lo mismo, cuando la masa "M" de la impureza es menor que la masa de los demás átomos de los cristales, cuando γ' es mayor que γ , o bien cuando ambas cosas están presentes. El caso que estudiamos ahora, es cuando ambas cosas $M < m$ y $\gamma' > \gamma$ se presentan. La condición expresada por la ecuación (56) no se cumple, por lo que no existen modos localizados para la raíz de la ecuación (53) con el signo negativo; Por otro lado, cuando n es par no existen modos localizados, así que la ecuación (54) no da condiciones de existencia de éstos modos localizados.

Analícemos ahora varios casos; Notemos primero que si $\eta = \rho = 1$, la condición de existencia de modos localizados ecuación (55), no se cumple y estaríamos en el caso de un cristal infinito.

Caso a) Hagamos $\eta = \rho = 2$, la condición si se cumple por lo que el valor de e^ξ dado por la raíz de la ecuación (53) con el signo positivo nos da $e^\xi = 8.12$. De la ecuación para las frecuencias, ecuación (51), tenemos $\omega_a^2 = 10.24\gamma/m$. Este caso tiene $\rho = \gamma'/\gamma = 2$ como el caso 1, del capítulo anterior, así que debemos esperar que la forma del modo sea modificada de alguna manera por la masa "M" de las impurezas.

Encontremos la forma del modo localizado para éste caso, como en el capítulo anterior, hasta aquí no hemos encontrado el valor de las constantes A y B, para esto usaremos la

ecuación de la solución general:

$$U(n) = A e^{i\theta n} + B e^{-i\theta n}$$

donde $n = -\infty \dots \infty$. Esta ecuación con k complejo $k = \mu + i\xi$ nos queda como:

$$U(n) = \begin{cases} B e^{n\xi} (-1)^n & \forall n \leq -1 \\ A e^{-n\xi} (-1)^n & \forall n \geq 1 \end{cases} \quad (57)$$

la sustituimos en la ecuación de movimiento para el átomo 1, ec. (40), junto con el valor de ω^2 obtenido por la sustitución de la raíz de la ecuación (53) en la ecuación (51) que en general está dada por:

$$\omega^2 = \frac{2\gamma'}{m} + \frac{\gamma}{m} \left(\frac{a^2 + 2a\sqrt{b} + b + 1}{a + \sqrt{b}} \right) \quad (58)$$

en la que hemos puesto:

$$a = \frac{\eta}{2} + \eta\rho - 1 \quad \text{y} \quad b = \eta(\eta\rho - 2)(1 + \rho) + \frac{\eta^2}{4}$$

Después del proceso algebraico encontramos la relación entre A y B como:

$$\begin{aligned} \frac{B}{A} = & - \frac{M}{m} \frac{\gamma'}{\gamma} \left(2 + \frac{a + 2a\sqrt{b} + b + 1}{a + \sqrt{b}} \right) + \\ & + \frac{\gamma'}{\gamma} \left(\frac{1}{a + \sqrt{b}} \right) + \frac{\gamma + \gamma'}{\gamma} \end{aligned} \quad (59)$$

Si se sustituye el valor de los parámetros η y ρ en esta última ecuación, obtenemos $B/A = -1$, o de otro modo, si sustituimos el valor de ω^2 en la ecuación de movimiento del átomo 1 con las soluciones (57) obtenemos también $B/A = -1$, lo cual quiere decir, que las amplitudes de las ondas entrantes son iguales pero de sentido contrario a las ondas que salen de la impureza. Normalicemos la amplitud de las ondas a $A=1$, de manera que las ecuaciones nos quedan como:

$$U(n) = \begin{cases} e^{n\xi} (-1)^n & \forall n \leq -1 \\ -e^{-n\xi} (-1)^n & \forall n \geq 1 \end{cases} \quad (60)$$

con lo que ya podemos graficar la forma de los modos localizados para este caso, ésto se muestra en la figura 16a.

Caso b) Con el valor para los parámetros $\eta=2$ $\rho=3$ la condición de existencia se cumple, así, de la misma manera que en el caso anterior $e^E=12.12$ y $\omega_b^2=14.18\gamma/m$, con éstos valores obtenemos otra vez la relación entre A y B como $B/A=-1$; - De nuevo la forma de los modos la dan las ecuaciones (60), figura 16b.

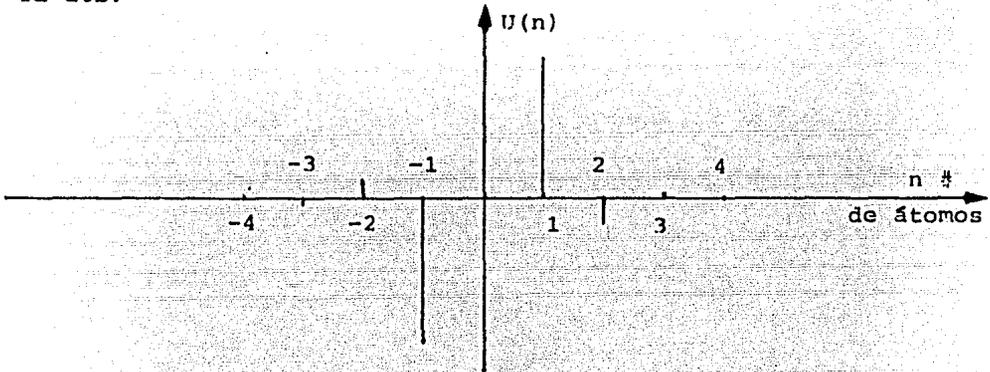


Fig. 16a. Forma del modo localizado para el caso "a".

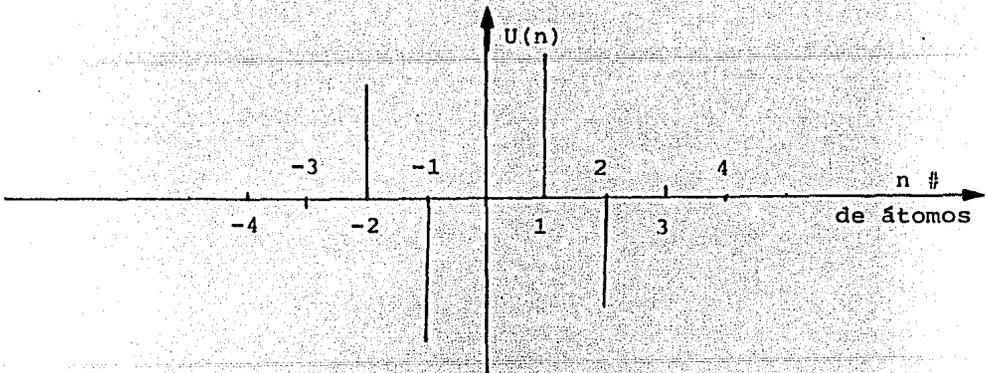


Fig. 16b. Forma del modo localizado para el caso "b".

En las tablas 1a y 2b se muestran los valores de los desplazamientos de los átomos de los cristales para los casos a y b respectivamente.

n	U(n)	-n	U(n)
1	0.123	1	-0.123
2	-0.015	2	0.015
3	0.0018	3	-0.0018
4	-0.00023	4	0.00023

Tablas 1a. Valores de los desplazamientos de los átomos para el caso "a".

n	U(n)	-n	U(n)
1	0.082	1	-0.082
2	-0.068	2	0.068
3	0.00056	3	-0.00056
4	-0.000046	4	0.000046

Tablas 2b. Valores de los desplazamientos de los átomos para el caso "b".

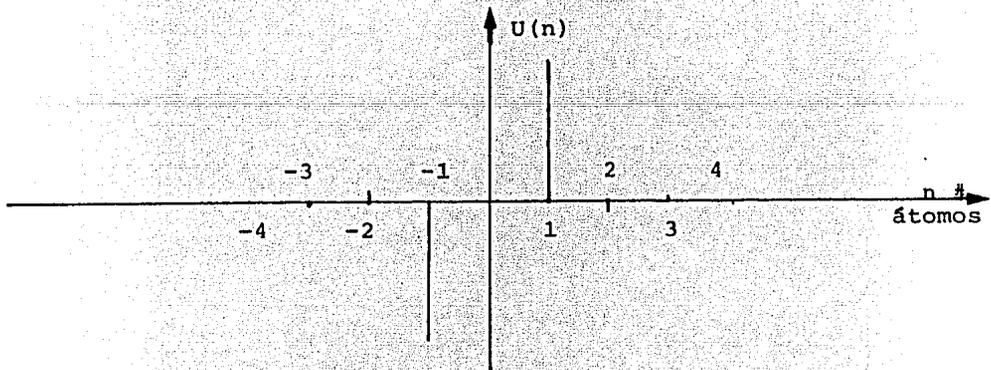


Fig. 16c. Forma del modo localizado para el caso "c".

Caso c) Cambiemos ahora los valores de los parámetros $\eta=3$ y $\rho=2$, obtenemos así $e^E=13.15$ y $\omega_c^2=15,23\gamma/m$. La relación entre A y B vuelve a ser $B/A = -1$, así que se puede grafi-

car de la misma manera que en los casos anteriores. En la figura 16c, se muestra la forma de éste modo localizado, mientras que en las tablas 3c se muestran los valores de los desplazamientos de los átomos de los cristales.

<u>n</u>	<u>U(n)</u>	<u>-n</u>	<u>U(n)</u>
1	0.076	1	-0.076
2	-0.0057	2	0.0057
3	0.00043	3	-0.00043
4	-0.000033	4	0.000033

Tablas 3c) Se muestran los valores de los desplazamientos para los átomos en el caso "c".

Caso d) Aquí el valor de los parámetros es $\eta=\rho=3$, con lo que se obtiene $e^{\xi}=19.10$ y $\omega_d^2=21.05\gamma/m$, con esto la relación $B/A = -1$. En la figura 17 hemos graficado los valores de $\omega_a^2, \omega_b^2, \omega_c^2$ y ω_d^2 . Se ve también que todos éstos valores para la frecuencia de los modos localizados están por encima de la banda acústica y se encuentran en la región de frecuencias prohibidas. En las tablas 4d se dan los valores de los desplazamientos de los átomos de los cristales alrededor de sus posiciones de equilibrio. Se puede observar que prácticamente en el tercer átomo - la onda se ha amortiguado casi totalmente.

<u>n</u>	<u>U(n)</u>	<u>-n</u>	<u>U(n)</u>
1	0.052	1	-0.052
2	-0.0027	2	0.0027
3	0.00014	3	-0.00014
4	-0.0000075	4	0.0000075

Tablas 4d) Se muestran los valores de los desplazamientos para los átomos en el caso "d".

Debemos hacer notar aquí que la forma de los modos localizados para todos los casos tratados en este capítulo tienen esencialmente las mismas características de los casos tratados en el capítulo anterior, difieren sin embargo, en que las ondas se amortiguan más rápidamente.

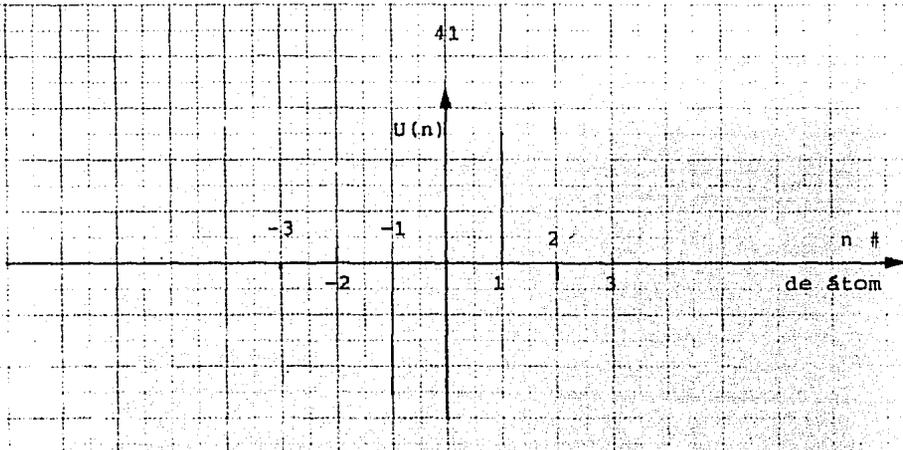


Fig. 16d. Forma de los modos localizados para el caso "d".

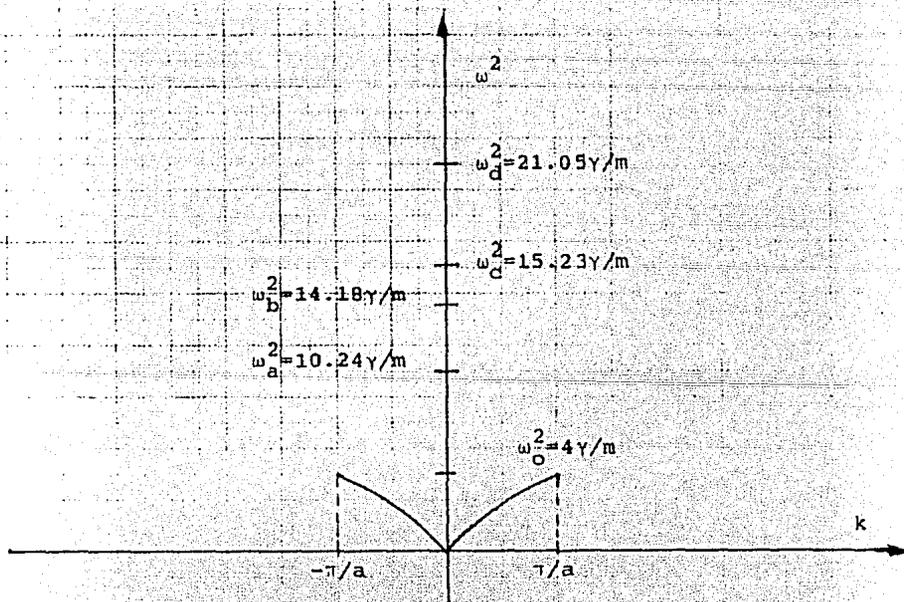


Fig. 17. Se muestran los valores de las frecuencias para los modos localizados en los casos a, b, c, y d.

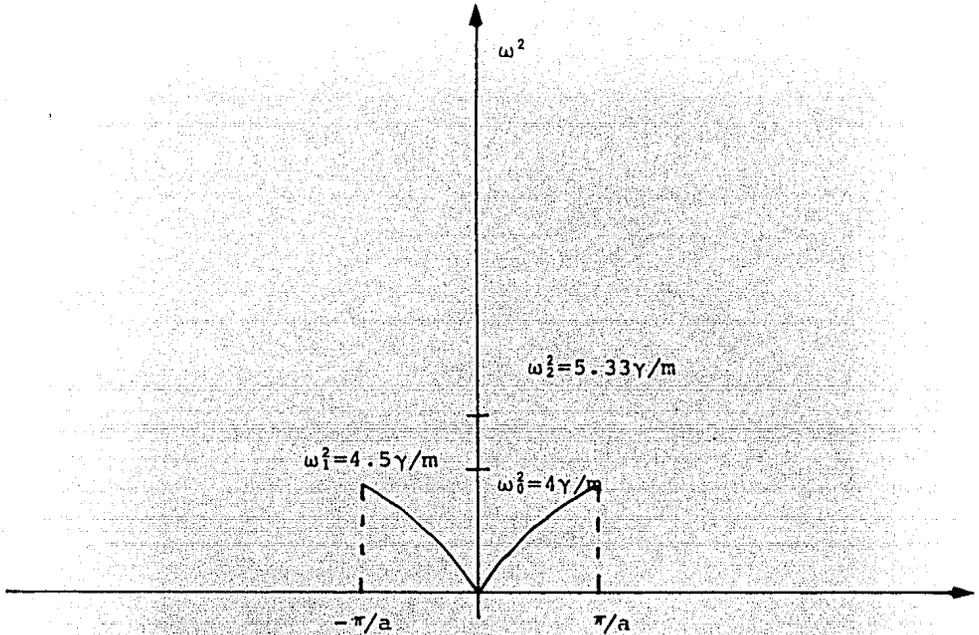


Fig. 18. Se muestran los valores de las frecuencias para los modos localizados en los casos ω_1^2 y ω_2^2 .

Analizaremos ahora la ecuación (45) con el signo negativo, ésto es :

$$M\omega^2 - \gamma + \gamma e^{ik} = 0 \quad (61)$$

nuevamente k debe ser un complejo dado como $k = \mu + i\xi$ de manera que haciendo una vez más lo que hemos hecho en los casos anteriores, obtenemos el valor de $\mu = n\pi$ y con ésto el valor para la frecuencia dado por ω como:

$$\omega^2 = \begin{cases} \frac{\gamma}{M} - \frac{\gamma}{M} e^{-\xi} & \text{para } n \text{ par} \\ \frac{\gamma}{M} + \frac{\gamma}{M} e^{-\xi} & \text{para } n \text{ impar} \end{cases}$$

De la ecuación para el cristal infinito con k complejo, obtenemos:

$$\omega^2 = \begin{cases} \frac{2\gamma}{m} + \frac{\gamma}{m} (e^\xi + e^{-\xi}) & \text{para } n \text{ impar} \\ \frac{2\gamma}{m} - \frac{\gamma}{m} (e^\xi + e^{-\xi}) & \text{para } n \text{ par} \end{cases}$$

resolviendo simultaneamente para n impar obtenemos:

$$x^2 + x(2 - \frac{m}{M}) - \frac{m}{M} + 1 = 0 \quad (62)$$

en donde hemos puesto $x=e^\xi$. Esta ecuación tiene dos raíces que con la condición de que $e^\xi > 1$, nos da las condiciones de existencia de los modos localizados. La raíz con el signo positivo delante del radical, nos da $m/M > 2$, que es condición de existencia de modos localizados debidos a la impureza de masa "M". La raíz con el negativo no da modos porque no se cumple la condición de que $e^\xi > 1$. Debido a que en este analisis no aparece γ' , la interacción relacionada con la interfase, los modos localizados son únicamente por las impurezas, por lo que el signo positivo en la ecuación (45) nos da la información más general. Con objeto de hacer comparaciones entre las formas de los modos localizados, en los diferentes casos que hemos analizado, encontraremos primero la relación existente entre las constantes A y B para éste caso. Seleccionemos el valor de $m/M = 2$, así de la ecuación (60) tenemos que $e^\xi = 1$, por lo que en éste caso no existen modos. Recordemos que en el problema de la interfase, el parámetro $\gamma'/\gamma = 2$ sí da modo localizado. Demos ahora al parámetro m/M el valor de 3, se cumple la condición de existencia y $e^\xi = 2$, donde $\omega_1^2 = 4.5\gamma/m$. Si $m/M = 4$ tenemos que $e^\xi = 3$ y $\omega_2^2 = 5.33\gamma/m$. Los valores obtenidos para la frecuencia de los modos localizados se muestran en la figura 18.

Otra vez la forma de los modos está dada por las ecuaciones (57), pero debemos encontrar la relación existente entre A y B. Nuevamente sustituimos las soluciones. ecuaciones (57), en la ecuación de movimiento para el átomo 1, el valor encontrado para ω_1^2 , se obtiene $B/A = 1$, lo cual quiere decir que entran a la impureza ondas iguales a las que salen de ella. haciendo la normalización $A=1$ obtenemos las formas de los modos localizados para ambos casos, ω_1^2 y ω_2^2 , éstas se muestran en las fi

guras 19a y 19b. Los desplazamientos de los átomos alrededor de su posición de equilibrio, son de diferentes amplitudes y sus valores se ponen en las tablas 5 y 6 respectivamente para ambos casos.

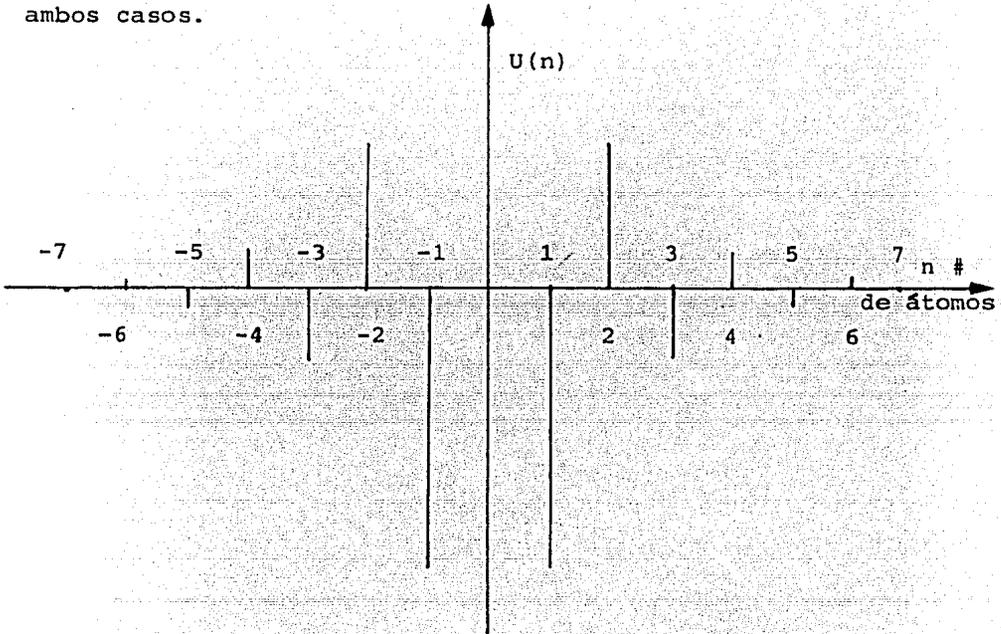


Fig. 19a. Se muestra la forma de los modos localizados para el caso de ω_1^2 .

<u>n</u>	<u>U(n)</u>	<u>-n</u>	<u>U(n)</u>
1	-0.5	1	-0.5
2	0.25	2	0.25
3	-0.125	3	-0.125
4	0.062	4	0.062
5	-0.031	5	-0.031
6	0.015	6	0.015
7	-0.0078	7	-0.0078
8	0.0039	8	0.0039
9	-0.0019	9	-0.0019
10	0.00097	10	0.00097

Tablas 5) Se muestran los valores de los desplazamientos de los átomos en el caso en que $\omega_1^2=4.5 \gamma/m$.

n	U(n)	-n	U(n)
1	-0.33	1	-0.33
2	0.111	2	0.111
3	-0.037	3	-0.037
4	0.012	4	0.012
5	-0.0041	5	-0.0041
6	0.0013	6	0.0013
7	-0.00045	7	-0.00045
8	0.00015	8	0.00015
9	-0.00005	9	-0.00005
10	0.000016	10	0.000016

Tablas 6) Se muestran los valores de los desplazamientos de los átomos en el caso en que $\omega_2^2 = 5.33\gamma/m$.

Aquí también podemos observar que además de que existe simetría en la forma de los modos localizados, en el átomo número 8 la onda se ha amortiguado casi totalmente en el primer caso. En el segundo caso sucede lo mismo, solo que en el átomo número 5 la onda se ha amortiguado casi totalmente.

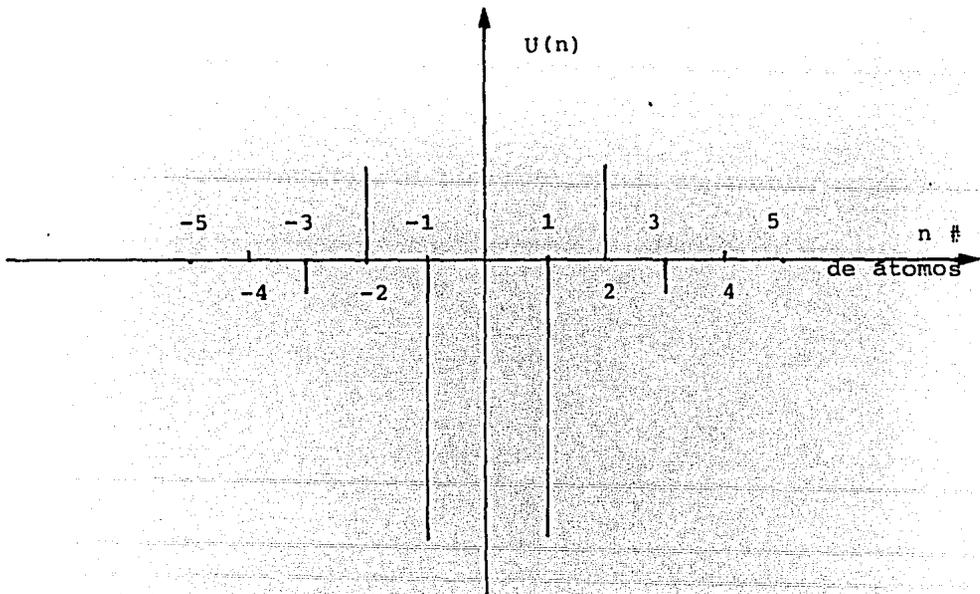


Fig.19b. Forma de los modos localizados para el caso en que ω_2^2 es la frecuencia de los modos.

Refiramonos a las figuras 17 y 18. Observemos- que el valor de "k" para cada una de las frecuencias ω_a , ω_b , ω_c , ω_d , de la figura 17, ω_1 , y ω_2 de la figura 18, dado por la rela- ción de dispersión para el cristal infinito, ecuación (10) o -- bien la ecuación (6), es el número de onda para cada coaso, no- obstante debemos tener en cuenta que:

1) Los valores de la frecuencia mencionados, - pertenecen a los diferentes modos localizados, en la interfase- y en la superficie de los cristales con impurezas en las ori--- llas. 2) fueron obtenidos haciendo a "k" compleja. 3) además, - se obtuvo el valor de μ como $\mu = n\pi$ donde $n = \dots$, pero que - los modos existen cuando n es impar solamente.

De lo anterior se obtiene que la parte real - de k es $\mu = n\pi$ siendo n impar. Los valores para ξ y para k en - cada uno de los casos se ponen en la tabla siguiente:

$\xi_a = 2.1$	$k_a = \pi + 8.116i$
$\xi_b = 2.49$	$k_b = \pi + 12.097i$
$\xi_c = 2.58$	$k_c = \pi + 13.154i$
$\xi_d = 2.94$	$k_d = \pi + 18.997i$
$\xi_1 = 0.70$	$k_1 = \pi + 2i$
$\xi_2 = 1.1$	$k_2 = \pi + 2.99i$

Se puede hacer una gráfica de la frecuencia ω contra el número- de onda k, como lo muestra la figura 20, en donde se recuerda - que se ha supuesto que el parámetro de la red es 1. Además, só- lo cuando n es impar existen modos localizados.

RESUMEN.- En este capítulo, hemos tratado de- complicar de la manera más sencilla, nuestro problema de inter- fase, poniendo en las orillas de los cristales una impureza iso- tópica; Se ha encontrado que pueden existir modos localizados - debidos a la interfase modificados de cierta manera por las im- purezas en los átomos -1 y 1, siendo ellos mismos los átomos -- que más se desplazan desde su posición de equilibrio y en direc- ciones opuestas.

La forma de los modos localizados debidos só- lo a las impurezas, muestran que los átomos impurezas -1 y 1, - tienen la misma dirección en su amplitud, amortiguándose el mo-

vimiento vibracional de los átomos de los cristales conforme se alejan de las impurezas y de la interfase.

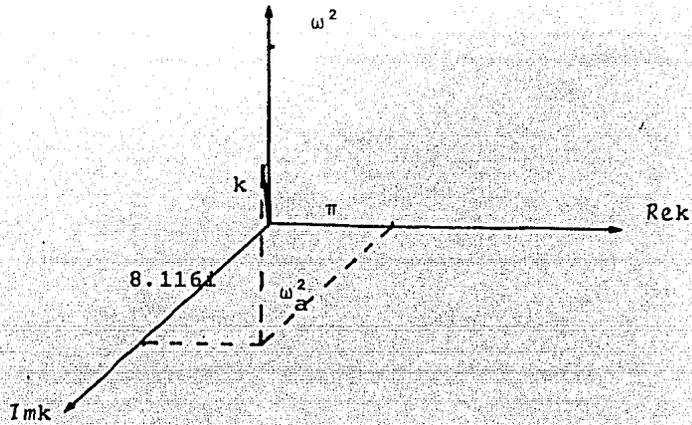


Fig. 20. Se muestra el valor del número de onda para el caso a, con $n=1$ y $a=1$.

Finalmente se obtuvieron los valores para el número de onda para los 4 casos tratados en la interfase con impurezas y en los dos casos tratados en la superficie de los dos cristales.

C O N C L U S I O N E S .

a) SOBRE EL MODELO.

El modelo propuesto, dos cadenas semi-infinitas monoatómicas con interfase sin impurezas y con impurezas, es un buen modelo para entender los modos vibracionales localizados en la interfase. Históricamente las cadenas lineales han servido para tal fin. Además, dicho modelo es un recurso didáctico para la enseñanza de la Física en la orilla de un cristal en cualquier curso de Estado Sólido en la literatura.

b) SOBRE EL METODO.

El método de la Matriz de Dispersión, es un método sencillo y comprobado en muchos problemas de diferentes ramas de la Física, por lo que se puede confiar plenamente en él, más todavía, la Matriz "S" encierra la dinámica del problema; Sin embargo, en nuestro caso podemos decir que sí, existen pocos parámetros, como en el caso de nuestro primer problema, la solución es sencilla y analítica. A medida que existen más parámetros, la solución sigue siendo analítica, pero se complica cuando éstos aumentan, por ejemplo en el segundo problema. Cuando los parámetros se aumentan más todavía, como en el último problema tratado en nuestro caso, la complicación se hace cada vez mayor hasta el caso en que se hace inmanejable algebraicamente, caso éste en el que las impurezas sean distintas y tengan interacciones también distintas con las demás masas de las cadenas.

Creemos que el método junto con el modelo son

lo suficientemente buenos y consistentes para obtener resultados por los cuales se pueda comprender cualitativamente la Física del Estado Sólido y ser a su vez un buen método didáctico.

c) SOBRE LOS RESULTADOS.

Los resultados obtenidos en los diferentes problemas de este trabajo están de acuerdo con los demás autores, como por ejemplo, con Saxon y Hunter, en los que la frecuencia de los modos localizados se encuentra en la región de la banda prohibida, para lo cual es necesario considerar el plano complejo, esto es, en otras palabras, que la interfase es un centro dispersor que rompe la regularidad de los cristales, en donde las ondas de Bloch que viajan en direcciones opuestas antes y después de la interfase, se deben acoplar, este acoplamiento se expresa por medio de la Matriz de Dispersión y se introducen nuevos niveles de energía debido a la interfase, estos nuevos niveles de energía ocurren en las regiones de energías prohibidas del cristal perfecto. Por otro lado, las ondas salientes de la interfase son ondas atenuadas hacia el interior de los cristales, es decir, que los átomos que están en la región de la interfase vibran con mayor amplitud que aquellos que están alejados de la interfase o centro dispersor.

Cuando existen además de la interfase, átomos impurezas, estas modifican las energías de los modos localizados, haciendo que aparezcan nuevos estados de energía y diferentes amplitudes en los átomos impurezas y en los átomos cercanos a éstos, localizando al modo vibracional y dependiendo de la masa de las impurezas, la interacción en la interfase y las interacciones con los demás átomos de los cristales. Los problemas tienen solución analítica, no obstante la complejidad en el álgebra.

Los resultados obtenidos en este trabajo son novedosos en tanto que el problema de la interfase con y sin impurezas en las orillas de los cristales, no ha sido resuelto hasta la fecha, con el método de la Matriz de Dispersión, resultados éstos que son lo suficientemente confiables por lo comprobado del método empleado; Más aún, creemos que el proble

ma así como los resultados obtenidos, son un tratamiento original en la Física de Superficies. De la misma manera, estamos convencidos que el planteamiento de los problemas expuestos y el tratamiento que de ellos se dá, es didáctico, pues se puede emplear como método para la enseñanza de la Física de Superficies, en forma cualitativa.

B I B L I O G R A F I A.

AUTOR	TITULO	EDITORIAL
1.- Halliday and Resnick tomo I	Física	CECSA.
2.- Zemansky	Calor y Termodinámica	Aguilar.
3.- Eugene Merzbacher	Quantum Mechanics	Wiley I E.
4.- Stephen Gasiorowics	Quantum Physics	Wiley I.E.
5.- Mckelvey	Solid State and semiconductor physics	Harper and Row.
6.- A. J. Dekker	Solid State physics	Prentice Hall Inc
7.- Saxon and Hunter	Some electronic properties of a dimensional cristal model.	Philips Research Reports No. 4 1949.
8.- Melvin Lax.	Localized Perturbations	Letters to editor 1954.
9.- Montroll and Potts.	Effect of defects on lattice vibrations.	Phisics Review V-2 October 1955.
10.- Hori and Asahi.	On the Vibration of Disorded lineal lattice	Progress of Theoretical Physics, v17 #4 April 1957.
11.- Yoshiichi Fukuda.	Vibration of linear lattice containing impurities	Journal of the Physiccal Society of Japan, V17 # 5 May 1962.

- 12.- Hori and Asahi. Scatterin Matrix and surface modes. Progress of Theoretical Physics, V-31# 1 January 1964.
- 13.-R. F. Wallis Surface Effects on lattice vibrations. Surface Science v-2 1964.
- 14.- Pierre Masri and Leonard Dobrzyński Studies of Interface phonons. Surface Science V-34 1973.
- 15.- A. A. Maradudin, E. W. Montroll and G. H. Weiss. Theory of lattice dynamics in the harmonic approximation Accademics Press New York 1963.
- 16.- Arthur Beiser Perspectives of modern physics. McGraw-Hill Kogakusha.