

2 ej.
37



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA
DE MEXICO**

FACULTAD DE CIENCIAS

**EFFECTO SOBRE LAS VIBRACIONES EN UNA RED
DIATOMICA DEBIDO A UNA IMPERFECCION LOCAL**

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:

GENOVEVA OLGUIN RAMIREZ



México, D. F.

Diciembre de 1986



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 está 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.

INDICE

	Pags.
INTRODUCCION	(1)
CAPITULO I	
1.- Red monoatómica perfecta	(4)
2.- Red monoatómica con imperfección	(10)
2.1.- Planteamiento y solución del problema	(11)
2.2.- Resultados	(16)
CAPITULO II	
1.- Red diatómica perfecta	(23)
2.- Red diatómica con imperfección	(36)
2.1.- Planteamiento y solución del problema	(38)
CAPITULO III	
1.- Análisis de la ecuación de valores propios	(44)
2.- Construcción de la gráfica de X como función del parámetro ρ para toda \mathcal{E}	(45)
3.- Soluciones para los modos localizados	(51)
4.- Resultados	(59)
CONCLUSIONES GENERALES	(64)
BIBLIOGRAFIA	

INTRODUCCION

Dentro de la Física del estado Sólido el estudio de los cristales ocupa un lugar importante ya que la característica de alta simetría en estos sistemas nos ayuda a resolver los problemas que se presentan en éstos, en forma relativamente sencilla. De la gran mayoría de los efectos macroscópicos -- que se presentan en cristales es importante reconocer que -- una gran cantidad de ellos son producto de la incorporación o de la ya existencia natural de las imperfecciones. Ha sido muy estudiada la influencia de estas imperfecciones en el -- comportamiento de ciertos fenómenos que ocurren en halogenuros alcalinos o semiconductores; tal es el caso de la condug tividad eléctrica, la conductividad térmica, el calor especí fico, el coeficiente de absorción óptica, etc. En particular en los estudios de absorción óptica, al hacer incidir luz so bre estos sistemas se tienen una serie de trabajos que se -- avocan al proceso de interacción entre los fonones del cris- tal y los fotones, evaluándose como parámetro el coeficiente de absorción óptica; los resultados experimentales obtenidos son abundantes y se deben principalmente a fenómenos micros- copicos.

El tipo de interacción que a nosotros nos interesa es -

el que se realiza entre la luz y los modos localizados del cristal. Existen una gran cantidad de teorías para explicar dicho fenómeno las cuales están publicadas en la literatura especializada (1) (2) y a pesar de los muchos avances que se han logrado en este tema, una serie considerable de dificultades han sido mencionadas por diversos autores para dar una explicación correcta de esto a nivel microscópico y los modelos se han vuelto cada vez más complejos lo cual, ha obligado a que los cálculos correspondientes sean extraordinariamente complicados (3). Sin embargo, se han publicado una gran cantidad de modelos sencillos con la finalidad de encontrar en algunos casos resultados que se puedan obtener en forma más simple y que al menos den una respuesta cualitativa. Dentro de este tipo de sistemas sencillos está el modelo del cristal lineal diatómico con interacciones a primeros vecinos el cual también ha sido abordado con diferentes métodos matemáticos para obtener las frecuencias de los modos localizados cuando se introducen en él diferentes tipos de impurezas. Aun en este caso de modelo sencillo, la solución de estos problemas se vuelve tan complicada que en la mayoría de los trabajos no se encuentran soluciones analíticas sino sólo bien de tipo numérico.

Hay un caso para éste tipo de red de masas puntuales con un modelo de imperfección muy sencillo que no ha sido reportado en la literatura, y éste se refiere al estudio de los modos localizados en una red diatómica cuando se cambia una sola -- constante de interacción. El propósito de este trabajo es estudiar este caso, usando una nueva metodología matemática que simplifica el cálculo y permite la obtención de la solución -- en forma analítica.

En el capítulo I se estudiará el problema de una red monatómica con una constante de interacción diferente, usando el método de las ecuaciones de diferencias, y luego se compara con los resultados obtenidos por otros autores.

En el capítulo II nos centraremos en el estudio del cristal diatómico con una constante de interacción diferente, que es la parte esencial de este trabajo, dejando para el capítulo III el análisis de los resultados y las conclusiones.

C A P I T U L O I

Se empezará éste capítulo presentando un resumen breve de las frecuencias y formas de los modos normales de vibración en una red monoatómica unidimensional, infinita, con interacciones a primeros vecinos. En seguida, se analizarán las frecuencias y las formas de los modos normales de vibración en una red monoatómica unidimensional, infinita, con interacciones a primeros vecinos, que contiene una imperfección local, que consiste en cambiar una constante de interacción entre dos átomos vecinos cercanos. En este análisis se seguirá el método de las ecuaciones de diferencia, que resuelve el problema como un problema de valor característico (4).

I.-RED MONOATOMICA PERFECTA

El modelo que vamos a utilizar en el estudio de la red monoatómica perfecta consiste de una cadena unidimensional de átomos con la misma masa, que están unidos entre sí mediante fuerzas lineales del tipo Hooke, como se muestra en la figura I.1.

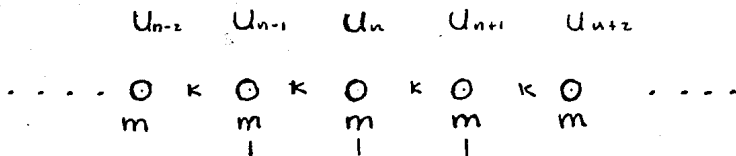


Figura I.1.- Cadena unidimensional de átomos con masa m y constante de interacción K .

En estado de equilibrio, los átomos están igualmente espaciados (a parámetro de la red que lo tomaremos unitario), en estado de excitación producido por la vibración, los átomos realizan movimientos periódicos alrededor de sus posiciones de equilibrio. Denotaremos por U_n a la amplitud de estos movimientos, el subíndice n representa el número del átomo, m la masa de los átomos y K la constante de la fuerza de interacción entre los átomos. En este caso la interacción -- que estamos considerando es a primeros vecinos. De acuerdo a lo anterior, la fuerza neta aplicada al átomo n se puede expresar de la siguiente manera:

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

Como la dinámica de la red estará descrita por la segunda ley de Newton, podemos escribir:

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

Para resolver la ecuación (2), ya que estamos estudiando movimientos vibratoriales, propondremos soluciones periódicas que tienen la forma:

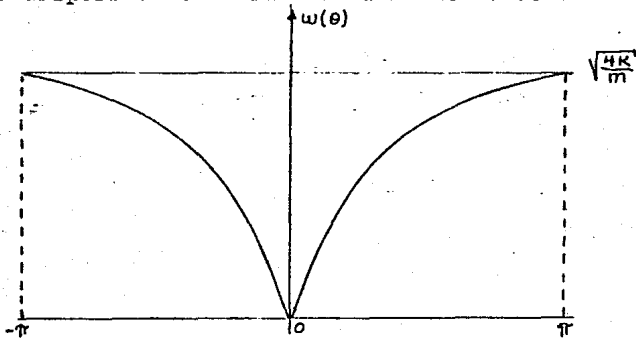
$$U_n = e^{i\omega t} X_n \quad (3)$$

donde ω es la frecuencia angular de los modos normales de vibración. Ahora derivamos los desplazamientos ecuación (3) dos veces con respecto al tiempo y sustituimos en la ecuación (2), obteniendo:

$$-m\omega^2 X_n = K(X_{n+1} + X_{n-1} - 2X_n) \quad (4)$$

En (4) la X_n denota las amplitudes máximas de los desplazamientos de los átomos en la red. La ecuación (4) es una ecuación de diferencias finitas, homogénea, de segundo orden, que puede resolverse proponiendo soluciones heurísticas como se hace en los libros de texto ver por ejemplo: McKelvey⁽⁵⁾, Dekker⁽⁶⁾, Mittel⁽⁷⁾, Brillouin⁽⁸⁾. En este trabajo utilizaremos los resultados que se obtuvieron via el método de las ecuaciones de diferencia usando el método de operadores⁽⁹⁾. Estos resultados, que son bien conocidos, los podemos resumir en la siguiente forma: Tenemos -- frecuencias para todos modos de vibración que se encuentran dentro de una rama, que se llama "bóndulo". Dichas fre-

cuencias toman valores que var. desde una frecuencia mínima de vibración 0 hasta una frecuencia máxima de vibración -- igual a $\sqrt{\frac{4K}{m}}$. La relación de dispersión para las frecuencias en función del número de onda θ está dada por $\omega = \frac{4K}{m} \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)$. En la gráfica I.1 se muestra la relación de dispersión como función del número de onda θ .



Gráfica I.1.- Relación de dispersión de la red lineal monoatómica como función del número de onda θ .

La figura I.2 muestra la forma de los modos normales de vibración que se obtuvo usando la solución general de la ecuación (4) en esta región de frecuencias y que esta dada por:

$$X_u = A \cos(n\theta + B) \quad (5)$$

donde A y B son constantes arbitrarias. Los desplazamientos de la figura I.2 son longitudinales puesto que la red es lineal, aunque para mayor facilidad en la observación se trazaron en forma transversal.

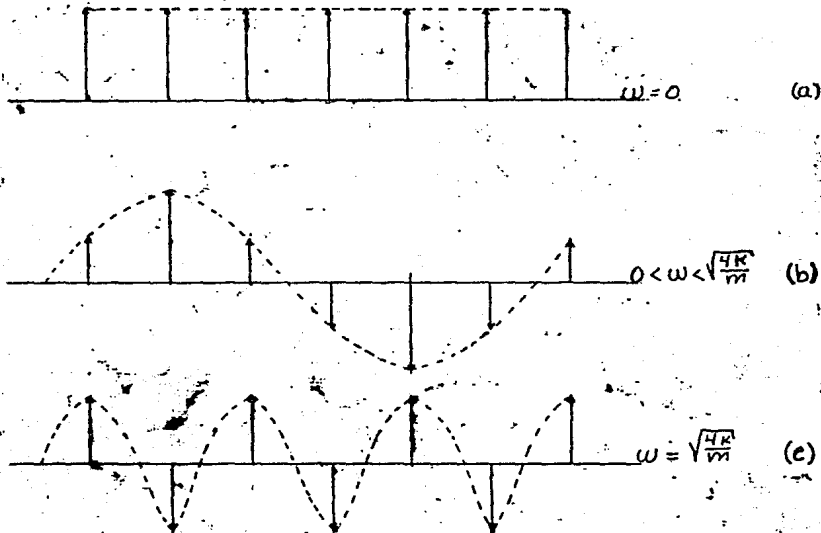


Figura I.2.- Forma de los modos normales de vibración. a) en el límite inferior de la rama, b) dentro de la rama, c) en el límite superior de la rama.

Se observa claramente de esta figura que con excepción de la frecuencia $\omega = 0$ que corresponde al caso del despla

zamiento de la red como un todo, estas formas de los modos normales son periódicas y la longitud de onda disminuye conforme aumenta la frecuencia del modo normal de vibración. Esos resultados coinciden con los obtenidos por otros autores y referimos al lector al libro de Brillouin⁽⁸⁾ en donde una descripción más completa de estas formas de vibrar de la red son presentadas.

También de la ecuación (4) podemos obtener modos normales de vibración con frecuencias que son mayores a la frecuencia máxima de la rama acústica. Estas frecuencias pertenecen a los modos localizados y la forma de la solución ahora será:

$$X_n = C_1 E_1^n + C_2 E_2^n \quad (6)$$

con

$$E_1 = \frac{-\Omega + \sqrt{\Omega^2 - 4}}{2} \quad (7)$$

donde $\Omega = X - 2$ y $X = \frac{m\omega^2}{k}$

además en este caso E_1 y E_2 son números reales y recíprocos. Es evidente que estas soluciones tienen forma de sucesiones crecientes o decrecientes y que nos servirán para construir la solución en redes con imperfecciones.

2. RED MONOCAMERAL CON UNA IMPERFECCION LOCAL.

El problema de calcular las frecuencias y las formas de los modos normales de vibración localizados en una red monoatómica con interacción a primeros vecinos tipo Hooke y considerando una imperfección local que consiste en cambiar una de la constante de interacción entre dos átomos vecinos fue resuelto por vez primera por Montroll y Potts⁽¹⁰⁾, utilizando el método de la función de Green. Montroll y Potts encontraron solamente un modo localizado cuya condición de existencia es la siguiente: si la constante de interacción diferente es más grande que la constante de interacción de la red perfecta, tendremos un modo localizado. La frecuencia de este modo local siempre es mayor que la máxima frecuencia de la rama acústica para los modos del cristal perfecto y la forma es antisimétrica respecto al punto medio entre las posiciones de equilibrio de los átomos afectados por la interacción distinta. Durante muchos años este problema sencillo no fue abordado por ningún autor sino hasta recientemente⁽¹¹⁾. En este trabajo los autores usan un método diferente para resolver este tipo de problemas en redes cristalinas con imperfección local, usando el método de la red perfecta y resolviendo el caso de la red monoatómica de la siguiente manera: -

diferente obtienen el resultado ya anteriormente encontrado por Montroll et. al. pero en una forma muy sencilla. Este problema también ha sido resuelto usando el método de las ecuaciones de diferencia finita, como un problema de valores propios⁽¹²⁾ y es esta última forma de resolver el problema la que nosotros presentamos a continuación.

2.1. ESTRUCTURA DEL PROBLEMA Y SOLUCIÓN DEL PROBLEMA

La red monoatómica unidimensional, infinita con interacción a primeros vecinos mostrada en la figura I.1, ahora se ve afectada al introducir la imperfección local. Para esto - sustituimos a la constante de interacción entre los átomos colocados en los lugares -1 y 0 por una nueva constante de interacción que denotaremos por K' . La figura I.3 nos muestra la red lineal con la imperfección antes mencionada.

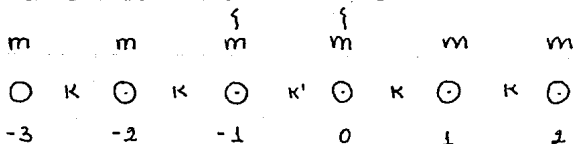


Figura I.3.- Cadena lineal monoatómica con una constante de interacción diferente entre los átomos colocados en los lugares -1 y 0 .

Como vamos a usar el método de las ecuaciones de diferencia y proponer la solución de éste problema como un problema de valor característico necesitamos la solución general de la ecuación (4). Esta solución ha sido obtenida usando el método de operadores⁽¹²⁾ y aquí usaremos esta solución para resolver nuestro problema. Queremos obtener modos localizados, de manera que necesitamos la parte de la solución general que nos describe este tipo de vibración. Ahora lo adecuado es subdividir el intervalo de validez de la ecuación (4) en dos regiones: a) $-\infty \leq n \leq -1$ y b) $0 \leq n \leq \infty$ y con ayuda de la solución general, proponer como solución de este problema lo siguiente:

$$X_n = C_1 E_1^n + C_2 E_2^n \quad -\infty < n \leq -1 \quad (8)$$

$$X_n = C_3 E_1^n + C_4 E_2^n \quad 0 \leq n < \infty \quad (9)$$

En la ecuación (8) C_1 y C_2 son constantes arbitrarias. También en la (9) lo son C_3 y C_4 .

Las condiciones a la frontera en este problema coinciden con las condiciones para tener modos localizados alrededor de la imperfección, en este caso las podemos escribir como:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} X_n = 0 \quad \lim_{n \rightarrow -\infty} X_n = 0$$

Estas condiciones de frontera determinan el problema de valores propios y nosotros debemos buscar que la parte de la solución general de la ecuación (4) las satisfaga. Como la solución que propusimos, ecuaciones (8) y (9) deben satisfacer las condiciones de frontera, esto determinará que los coeficientes C_1 y C_4 sean cero para que las partes de la solución sean convergentes, de manera que la solución propuesta se reduce a

$$X_n = C_2 E_1^{-n} \quad \text{si} \quad n \leq -1 \quad (10)$$

$$X_n = C_3 E_1^n \quad \text{si} \quad n \geq 0 \quad (11)$$

En las ecuaciones (10) y (11) hemos usado el hecho que $|E_1| < 1$ y que E_1 y E_2 son recíprocas. Los coeficientes C_2 y C_3 serán determinados por la unión apropiada de la solución en ambas regiones alrededor de la imperfección. Esta unión apropiada puede hacerse fácilmente utilizando las ecuaciones de movimiento de los átomos en las posiciones y que podemos escribir de la siguiente manera:

$$X_{-1} + X_0(\rho X - \rho - 1) + \rho X_1 = 0 \quad (12)$$

$$\rho X_{-2} + X_{-1}(\rho X - \rho - 1) + X_0 = 0 \quad (13)$$

en donde

$$K = K'\rho$$

Al sustituir las ecuaciones (10) y (11) en las ecuaciones -
(12) y (13) obtenemos:

$$C_2 [PE_1^2 + E_1(PX - P - 1)] + C_3 = 0 \quad (14)$$

$$C_2 E_1 + C_3 [(PX - P - 1) + PE_1] = 0 \quad (15)$$

Las ecuaciones (14) y (15) forman un sistema de ecuaciones lineales homogéneas con C_2 y C_3 como incógnitas y esta pareja de ecuaciones tiene solución diferente de la trivial si el determinante del sistema es igual a cero:

$$\begin{vmatrix} PE_1^2 + E_1(PX - P - 1) & 1 \\ E_1 & PX - P - 1 - PE_1 \end{vmatrix} = 0$$

Resolviendo este determinante obtenemos para E_1 la siguiente ecuación cuadrática:

$$E_1^2 P^2 + E_1 [2P(PX - P - 1)] + (XP - P - 1)^2 - 1 = 0 \quad (16)$$

Las raíces para E_1 de la ecuación (16) son:

$$E_1 = 1 - X \quad (17)$$

$$E_1 = \frac{2 - P(X - 1)}{P} \quad (18)$$

Sustituyendo el valor de E_1 en términos de X con -- ayuda de la ecuación (7) en la ecuación (17) obtenemos una de las raíces de la ecuación de eigenvalores que corresponde a la frecuencia $\omega=0$. Si sustituimos esta raíz en la ecuación (17) para obtener el valor de E_1 encontramos $E_1=1$. Con ayuda de las ecuaciones (14) ó (15) calculamos el valor de una de las constantes en términos de la otra la cual queda libre y la usaremos para normalizar. Esta solución -- así encontrada no satisface la condición de localización, de manera que no describirá modos localizados y no discutiremos más aquí esta solución. Ahora al sustituir E_1 en términos de X usando la ecuación (7) en la ecuación (18) obtenemos la frecuencia del modo localizado:

$$X = \frac{4}{\rho(2-\rho)} \quad (19)$$

También obtenemos como solución $X=0$ la cual está asociada con la frecuencia cero y que pertenece al modo normal asociado al límite inferior de la rama acústica. Ahora el sistema ya no es invariante ante la traslación de la red y la imperfección causa que esta frecuencia se pierda. El siguiente --

paso es encontrar el valor de E_1 con ayuda de la ecuación (18) en la cual sustituimos el valor de X ecuación (19), este valor de E_1 resulta ser $E_1 = \frac{\rho}{\rho-2}$. Con E_1 se puede obtener la solución general, ecuaciones (10) y (11), previo a esto es necesario determinar el valor de una de las constantes en términos de la otra. Para esto utilizaremos nuevamente alguna de las ecuaciones (14) ó (15). En el primer caso obtenemos:

$$\rho_2 = \frac{-\rho_3}{\rho E_1^2 + E_1(\rho X - \rho - 1)} \quad (20)$$

Tenemos que recordar que nuestra solución queda indeterminada hasta una constante arbitraria que usamos para normalizar. Es importante recordar que al calcular las frecuencias y obtener las soluciones necesitamos verificar que se satisficieran todas las condiciones de frontera.

3.2. RESULTADOS

Es fácil observar fácilmente de la ecuación (19) que en el caso $K' = K$, ($\rho = 1$) el cristal perfecto, la frecuencia del modo vibracional es $X = 4$, que corresponde a la máxima frecuencia de los modos normales del cristal perfecto. En este caso $E_1 = 1$; de la ecuación (20) $\rho_2 = \rho_3$, la

nera que la solución para el modo vibracional será:

$$X_n = C_3 (-1)^n \quad \forall n$$

En la figura I.4 podemos observar que la forma de la vibración corresponde a la vibración con máxima frecuencia de la rama acústica del cristal perfecto (ver figura I.2).

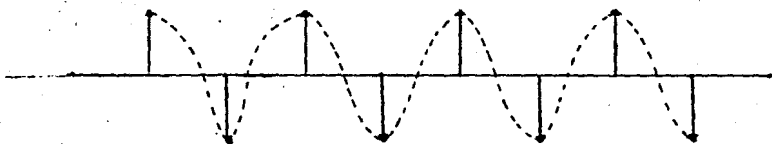
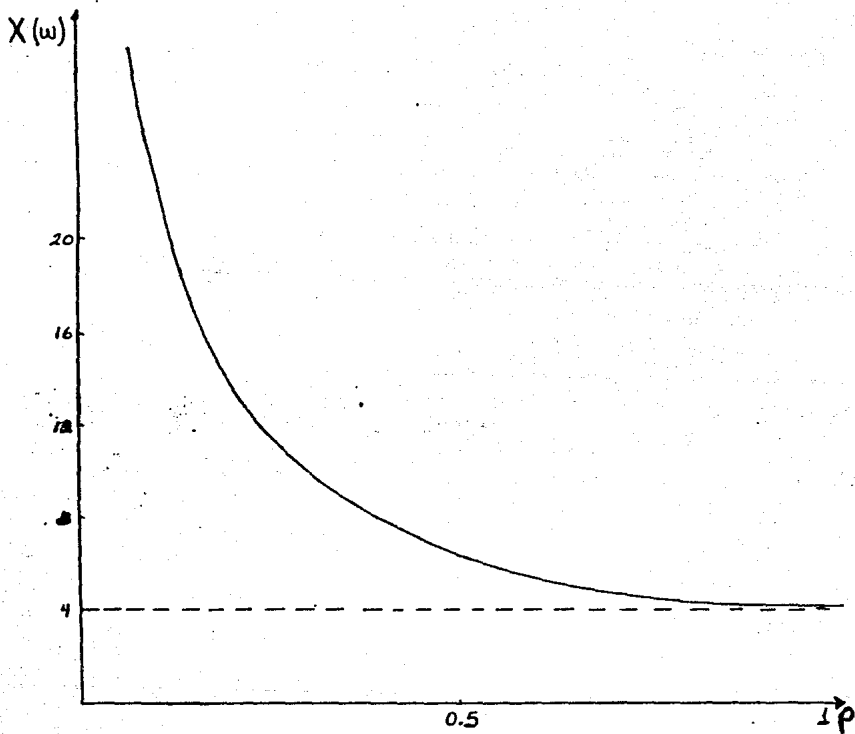


Figura I.4.- Forma del modo vibracional. En este caso

Quisieramos hacer notar que este tipo de vibración no satisface las condiciones de frontera, es decir la condición de localización, pero la incluimos para completar el trabajo.

En la gráfica I.2 mostramos la frecuencia del modo localizado como función del parámetro ρ . Podemos observar de esta gráfica que solamente tenemos modos localizados para valores de la constante de interacción K' mayores que la constante de interacción de la red perfecta. También se puede observar que si el valor de la constante de interacción K' aumenta, la frecuencia del modo localizado aumenta.



Gráfica 1.2.-Frecuencia de los modos localizados en función del parámetro ρ .

En la figura I.5 presentamos la evolución del modo localizado como función del parámetro ρ . De esta figura se puede observar que si el valor de la constante de interacción aumenta, el modo se localiza más rápidamente alrededor de la imperfección. También notamos el hecho de que este modo es antisimétrico respecto a la mitad de la distancia entre las posiciones de equilibrio de los dos átomos en donde se encuentra la constante de interacción diferente.

Ahora vamos a comparar nuestros resultados con los obtenidos por Montroll y Potts⁽¹⁰⁾ que usan el método de la función de Green. Para ellos el valor de la frecuencia está dada por su ecuación (3.40) que es:

$$\rho^2 = \left(\frac{\omega}{\omega_L} \right)^2 = \frac{\rho'^2}{(2\rho' - 1)}$$

donde ρ' es igual a $\frac{\delta''}{\delta}$ o $\frac{K'}{K}$, ω_L es la frecuencia del límite superior de la rama barrida para la red limpia. La que aquí se encuentra es

$$X = \frac{4}{\rho(2-\rho)}$$

y es fácil mostrar que es la misma que la obtenida por ellos.

Si comparamos estos resultados con los obtenidos cuando se usa el método de la onda reflejada⁽¹¹⁾ se observa también que la solución es exactamente la misma.

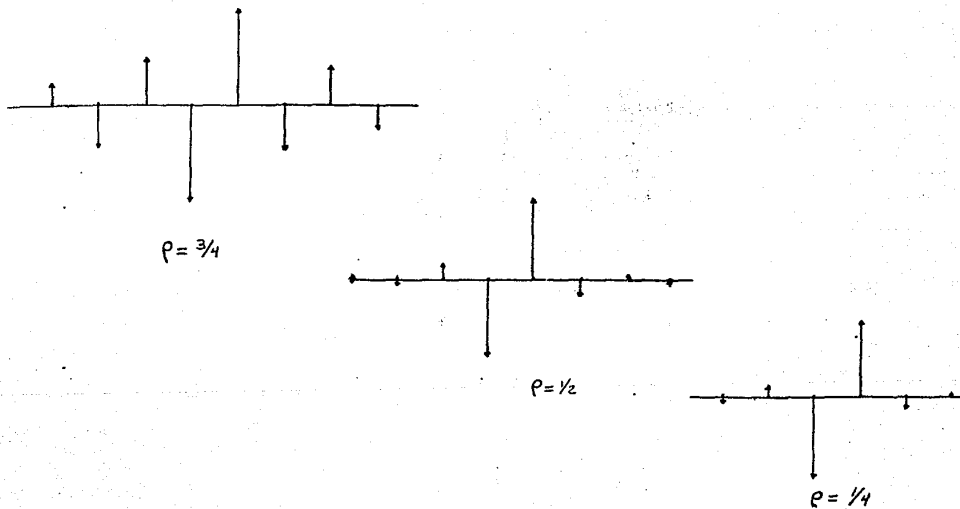


Figura I.5.- Evolución del modo localizado como función del parámetro ρ .

En este capítulo hemos presentado un resumen breve de la red lineal monoatómica con interacciones a primeros vecinos en la primera parte y en la segunda parte hemos presentado el cálculo de las frecuencias y las formas de los modos normales de vibración usando el método de las ecuaciones de diferencia en una red lineal monoatómica con interacciones a primeros vecinos que contiene como imperfección local una constante de interacción diferente a la de la red perfecta. Se ha encontrado un solo modo localizado de forma antisimétrica con frecuencia mayor que la máxima frecuencia del modo normal de la rama acústica. Este modo localizado solo existe para valores de la constante de interacción mayores que la constante de interacción de la red perfecta y aumenta su frecuencia cuando la constante de interacción diferente aumenta.

Para obtener la solución de los problemas que se encuentran en este capítulo hemos usado el método de las ecuaciones de diferencias y no el de la función de Green o el de la onda reflejada, ya que este método será la forma que usaremos para resolver el problema de la red diatómica y además creemos que el método es más sencillo que los dos mencionados anteriormente y con una diferencia que con métodos

heurísticos en cambio el método de las ecuaciones de diferencia es exacto.

C A P I T U L O I I

En este capítulo como en el anterior presentaremos un resumen de las frecuencias y formas de los modos normales de vibración de una red diatómica unidimensional infinita con interacciones a primeros vecinos. Después calcularemos las frecuencias y las formas de los modos normales de vibración en esta red con una imperfección local la cual se considerará al cambiar una constante de interacción entre dos átomos vecinos cercanos. El método que usaremos para realizar nuestro trabajo es el de las ecuaciones de diferencia⁽⁴⁾.

1. RED DIATÓMICA PERFECTA

El modelo que vamos a utilizar para el estudio de la red diatómica perfecta consiste de una cadena lineal con dos tipos de átomos con masas m y M , que están unidos entre sí mediante fuerzas armónicas como se muestra en la figura 2.1. Como en el caso de la red monoatómica perfecta tomaremos el parámetro de la red a unitario. Ahora numeraremos por celdas. Denotaremos por U_n y W_n a las amplitudes de los movimientos periódicos que realizan los átomos alrede-

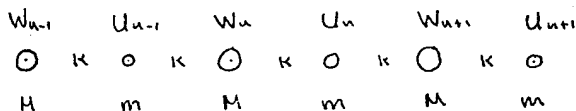


Figura 2.1.- Red unidimensional que tiene dos tipos de átomos de masas m y M y constante de interacción para la fuerza K .

donde de sus posiciones de equilibrio, tanto los de masa m como los de masa M respectivamente, el subíndice n representa el número de la celda y K es la constante de interacción a primeros vecinos. La fuerza neta aplicada al átomo n con masa m se puede expresar de la siguiente manera:

$$F_n^m = K(W_{n+1} - U_n) + K(W_n - U_n) \quad (1)$$

y la fuerza neta aplicada al átomo n con masa M es:

$$F_n^M = K(U_n - W_n) + K(U_{n-1} - W_n) \quad (2)$$

Nuevamente como la dinámica de la red está descrita por la segunda ley de Newton, podemos escribir las ecuaciones de movimiento del sistema como:

$$m \frac{d^2 U_n}{dt^2} = K(W_{n+1} + W_n - 2U_n) \quad (3)$$

$$M \frac{d^2 W_n}{dt^2} = K (U_n + U_{n-1} - 2 W_n) \quad (4)$$

Para resolver las ecuaciones (3) y (4) ya que los movimientos siguen siendo vibratoriales propondremos soluciones --periódicas que tienen la forma:

$$U_n = Q e^{i\omega t} X_n \quad (5)$$

para los átomos de masa m y:

$$W_n = Q e^{i\omega t} Y_n \quad (6)$$

para los átomos de masa M , donde ω es la frecuencia --angular de los modos normales de vibración. Al sustituir (5) y (6) en (3) y (4) obtenemos:

$$-m\omega^2 X_n = K (Y_{n+1} + Y_n - 2 X_n) \quad (7)$$

$$-M\omega^2 Y_n = K (X_n + X_{n-1} - 2 Y_n) \quad (8)$$

En la ecuación (7) así como en la (8) la X_n denota las amplitudes máximas de los desplazamientos de los átomos de masa m y la Y_n las amplitudes máximas de los desplazamientos de los átomos de masa M . Las ecuaciones (7) y (8) forman un sistema homogéneo de ecuaciones de diferencia finita, acopladas de segundo orden, que puede resolverse propo--

mismas soluciones heurísticas como se hizo en los libros de texto por ejemplo: McKelvey⁽⁵⁾, Denker⁽⁶⁾, Kittel⁽⁷⁾, Brillouin⁽⁸⁾...etc. Los resultados que mostraremos aquí se obtuvieron utilizando el método de las ecuaciones de diferencia⁽⁹⁾, y son exactamente los mismos que se encuentran en los libros de texto mencionados anteriormente. Las frecuencias de los modos normales de vibración se encuentran dentro de dos ramas, la rama acústica y la rama óptica, y estas frecuencias como función del número de onda están determinadas por la relación de dispersión que en este caso está dada por

$$m M \omega^4 - 2K(M+m)\omega^2 + 2K^2(1 - \cos \theta) = 0 \quad (9)$$

6

$$m M \omega^4 - 2K(M+m)\omega^2 + 4K^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} = 0 \quad (9.b)$$

en donde $\theta = \frac{q}{2}$. El análisis de la ecuación (9.1) se hará de la misma forma como se encuentra en un trabajo reciente⁽¹⁴⁾.

Si escribimos la ecuación (9.1) como

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

Como estamos analizando los modos normales del cristal infi-

nito sabemos que ω deberá ser real, de manera que -----

$0 \leq \text{sen}^2 \theta \leq 1$. Considerando primero la condición de --
 $0 \leq \text{sen}^2 \theta$ la ecuación (10) nos conduce a:

$$0 \leq \omega^2 \leq 2K \left(\frac{1}{M} + \frac{1}{m} \right) \quad (11)$$

lo cual indica que la frecuencia está restringida a variar --
entre cero y un valor máximo:

$$\omega_0 = \sqrt{2K \left(\frac{1}{M} + \frac{1}{m} \right)} \quad (12)$$

Si consideramos ahora la condición $\text{sen}^2 \theta \leq 1$, se tiene, de --
la ecuación (10) :

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

y para el caso límite $\text{sen}^2 \theta = 1$

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

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

$$\omega^2 = \frac{2K}{M} \quad \text{ó} \quad \omega^2 = \frac{2K}{m}$$

De la ecuación (10), y tomando el límite cuando $\text{sen}^2 \theta = 0$,
se tiene que $\omega^2 = 0$ o bien $\omega_0^2 = 2K \left(\frac{1}{M} + \frac{1}{m} \right)$; con lo que --
podemos asegurar que al menos en los límites, la frecuen--

cia puede tomar uno de los valores para el mismo número de onda. Si $M > m$, tendremos:

$$\omega_+ = \sqrt{\frac{2K}{m}} \quad \omega_- = \sqrt{\frac{2K}{M}} \quad (14)$$

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

Notese que $\omega_0 > \omega_+ > \omega_-$, sin embargo aún no se sabe qué sucede con la frecuencia entre los límites que se han obtenido. Para ello analizamos la condición $\sec^2 \theta < 1$, de esto se tiene

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

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

$$\omega^2 > \frac{2K}{M} \quad \text{y} \quad \omega^2 > \frac{2K}{m}$$

$$\omega^2 < \frac{2K}{M} \quad \text{y} \quad \omega^2 < \frac{2K}{m}$$

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

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

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

Hasta aquí sabemos que la curva de frecuencias está formada por dos ramas, y que, de acuerdo con las ecuaciones (15.1) y (15.2) existe una banda prohibida entre ellas, pero aún no sabemos la forma que tiene la curva. Para esto seguiremos el análisis hecho por Brillouin⁽⁸⁾ para construir la curva. De la relación de dispersión ecuación (9), podemos despejar a ω^2 :

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

expresando esta relación en términos de ω_0^2 , ω_+^2 y ω_-^2 , de acuerdo a las ecuaciones (12) y (14), se tiene

$$\omega^2 = \frac{1}{2} \left[\omega_0^2 \pm \sqrt{\omega_0^4 - 4\omega_+^2\omega_-^2 - 2\omega_0^2\theta} \right] \quad (16)$$

La cual podemos analizar bajo las siguientes condiciones, cuando θ tiende a cero y cuando θ tiende a $\pi/2$. Si θ tiende a cero, aproximamos $\cos^2 \theta$ a θ^2 , sustituyendo en la ecuación (16) y despreciando los términos de cuarto orden, se tiene:

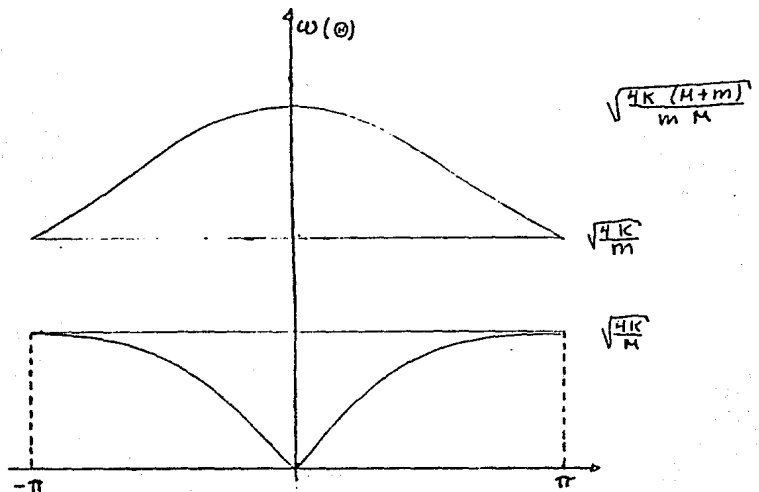
$$\omega_{H+}^2 = \omega_0^2 - \theta^2 \left[\frac{\omega_+^2 \omega_-^2}{\omega_0^2} \right] \quad (17)$$

$$\omega_{H-}^2 = \theta^2 \left[\frac{\omega_+^2 \omega_-^2}{\omega_0^2} \right]$$

en este caso los signos que están entre el paréntesis indican el signo utilizado del radical de la ecuación (16) respectivamente. Se ve claramente de las ecuaciones (17), que cuando $\Theta = 0$, $\omega_{(+)} = \omega_0$ y $\omega_{(-)} = 0$, a partir de estos valores $\omega_{(+)}$ decrece parabólicamente, mientras que $\omega_{(-)}$ crece parabólicamente conforme Θ aumenta. Cuando Θ tiende a $\frac{\pi}{2}$, podemos hacer el análisis sustituyendo Θ por $\frac{\pi}{2} - \delta$, y aproximando $\sin^2 \Theta$ a $(1 - \delta)^2$ se tiene:

$$\begin{aligned} \omega_{(+)}^2 &= \omega_+^2 + \delta^2 \left[\frac{\omega_+^2 \omega_-^2}{\omega_+ - \omega_-} \right] \\ \omega_{(-)}^2 &= \omega_-^2 - \delta^2 \left[\frac{\omega_+^2 \omega_-^2}{\omega_+ - \omega_-} \right] \end{aligned} \quad (18)$$

Obsérvese que $\omega_{(+)}$ crece parabólicamente y $\omega_{(-)}$ decrece parabólicamente conforme δ aumenta, y los límites son ω_+^2 y ω_-^2 respectivamente. Ya que la función que aparece en la ecuación (16) es tal que no tiene discontinuidades cuando el argumento es real, la forma de la curva debe ser parabólica y creciente desde cero hasta ω_- , y parabólica decreciente desde ω_0 hasta ω_+ conforme Θ aumenta. Después de este análisis podemos identificar a $\omega_{(+)}$ con la rama superior y a $\omega_{(-)}$ con la rama inferior. La representación de la curva ω como función del número de onda Θ se muestra en la gráfica 2.1. A la rama inferior se le sigue llamando acústica y a la rama superior se le conoce como rama óptica.



Gráfica 2.1.- Frecuencia de los modos normales de vibración en una red diatómica como función del número de onda Θ .

Quando $M < m$ simplemente $\omega_{(+)}$ corresponde a la rama inferior y $\omega_{(-)}$ correspondo a la rama superior (cambian los límites). Hay que recordar que $\Theta = \frac{q}{2}$ y esto realmente se debe a la forma en que numeramos el modelo presentado en la figura 2.1.

Las curvas mostradas se repiten cada 2π , debido a que la celda unitaria tiene una longitud $a = 1$ y la primera zona de Brillouin en este caso va desde $-\pi$ a π .

Las figuras 2.2 y 2.3 muestran las formas de los modos normales de vibración en la rama acústica y óptica, respecti-

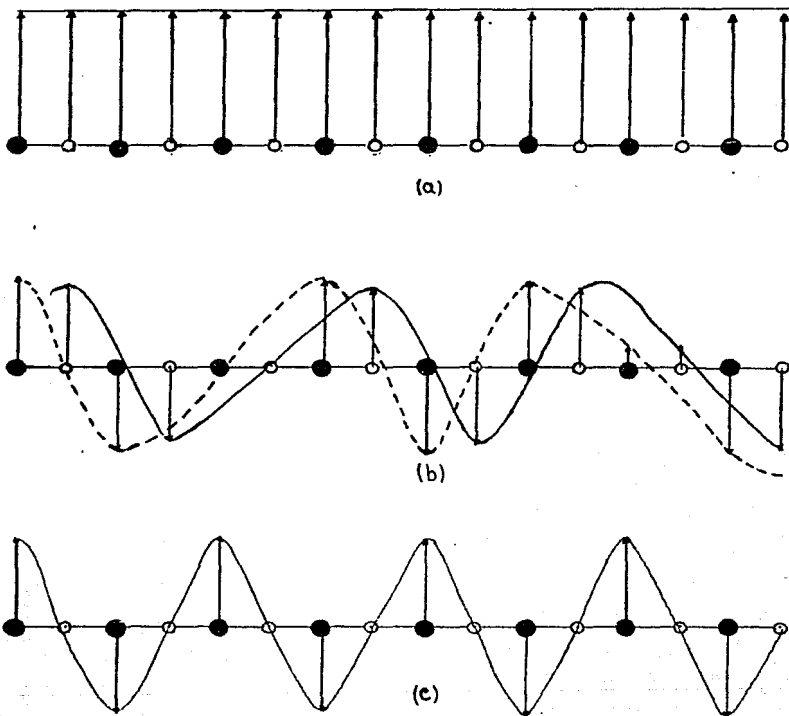


Figura 2.2.- Forma de los modos normales de vibración: a) en el límite inferior de la rama acústica, b) dentro de la rama acústica y c) en el límite superior de la rama acústica.

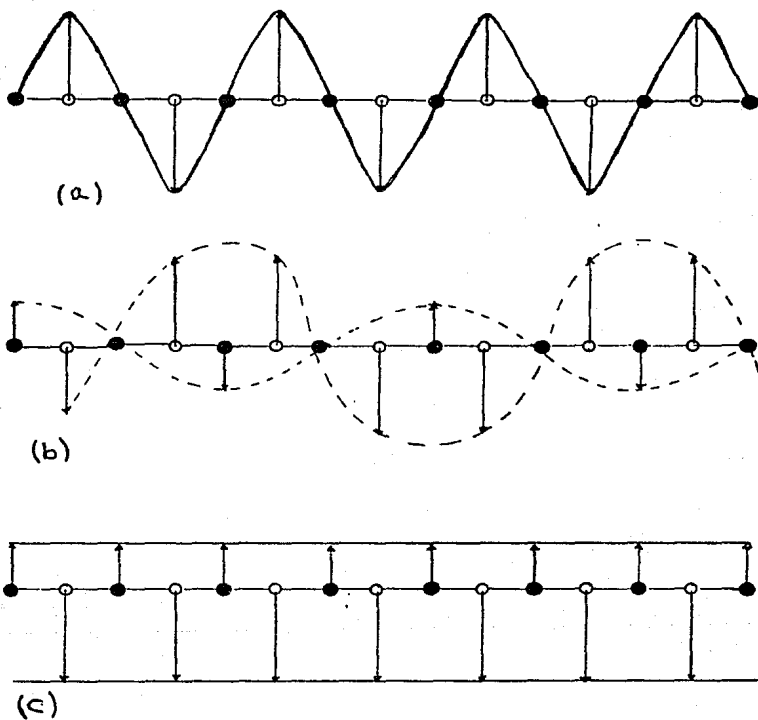


Figura 2.3.- Forma de los modos normales de vibración
 a) en el límite inferior de la rama óptica, b) en
 tro de la rama óptica, y c) en el límite superior de -
 la rama óptica.

vamente, que se obtuvieron⁽¹³⁾ usando las soluciones generales del sistema de ecuaciones (7) y (8) en las regiones de frecuencias anteriores y que están dadas por

$$Y_u = C \cos(n\theta + D)$$

$$X_u = C \left(\frac{\mathcal{E}X - 2}{X - 1} \right)^{1/2} \cos \left[\left(n + \frac{1}{2} \right) \theta + D \right]$$

donde $\mathcal{E} = \frac{M}{m}$. Las figuras muestran los desplazamientos en forma vertical aunque estos se realizan en la dirección longitudinal. C y D constantes arbitrarias. La X_u involucra una raíz cuadrada en la cual se toma el signo (-) para los modos normales de vibración de la rama acústica y el signo (+) para los modos normales de vibración de la rama óptica.

Al considerar la solución en el caso $\omega(+)$ se tiene un problema en la solución para los modos normales de vibración debido a que en términos de X ese límite de la rama acústica si $M > m$ y óptica si $M < m$ es 2 y la ecuación (20) nos queda indeterminada. Para encontrar la forma de vibración de este modo lo que hay que hacer es tomar casos límites cuando

X se aproxima a 2 por la derecha si $M > m$ y por la izquierda si $M < m$, así solucionamos este problema y obtenemos la forma de este modo normal de vibración.

En la rama acústica (figura 1.2) en el límite inferior o sea $\omega = 0$ la red se desplaza como un todo y conforme aumenta la frecuencia la longitud de onda asociada tanto a -

Los desplazamientos de los átomos de masa m como a los desplazamientos de los átomos M disminuye, hasta llegar a la frecuencia del límite superior de dicha rama en donde solamente se mueven los átomos más pesados y los átomos ligeros ya no se desplazan. En la rama óptica (figura 2.3) al aumentar la frecuencia la longitud de onda aumenta y en el límite inferior los átomos que vibran son los más ligeros y los más pesados se quedan quietos, al llegar a la frecuencia del límite superior tanto los átomos de masa m como los de masa M vibran y las amplitudes de sus desplazamientos están en proporción con la relación de sus masas. Los movimientos de los átomos de masa m y M en la rama acústica siempre están en fase mientras que en la rama óptica hay un desfase de 180 grados.

También del sistema de ecuaciones de diferencias que forman las ecuaciones (7) y (8) podemos obtener modos normales de vibración con frecuencias entre el límite inferior de la rama óptica y el límite superior de la rama acústica y a este intervalo de frecuencias se le llama brecha prohibida, otros modos normales de vibración se encuentran con frecuencias mayores a la frecuencia del límite superior de la rama óptica. Estas frecuencias pertenecen a los modos localizados y la forma de las soluciones es ahora ⁽¹³⁾

$$y_n = C_1 E_1^n + C_2 E_2^n \quad (21)$$

$$X_n = \left[\frac{E+1}{2-X} \right] y_n \quad (22)$$

donde
$$E_1 = \frac{\Omega + (\Omega^2 - 4)^{1/2}}{2} \quad (23)$$

$$\Omega = (\epsilon X - 2)(X - 2) - 2 \quad \text{y} \quad X = \frac{m \omega^2}{K}$$

E_1 y E_2 siguen siendo números reales y recíprocos como en el capítulo anterior y también estas soluciones tienen la forma de sucesiones crecientes o decrecientes que nos servirán para la construcción de la solución en redes diatómicas con imperfecciones.

2. RED DIATÓNICA CON IMPERFECCIÓN LOCAL

El problema de los modos normales de vibración en la red diatómica con interacciones a primeros vecinos que contiene diferentes modelos de imperfección local, ha sido completamente tratado en la literatura. Los primeros trabajos proponen como modelo de imperfección local un cambio en una de las masas atómicas de la red. Para una revisión de este problema se puede consultar la referencia (13). Un poco después se incorporan estudios en donde se cambia no solo la masa atómica sino también la constante de interacción del átomo

mo impureza. Dentro de estos trabajos podemos mencionar el cálculo de Bjork⁽¹⁵⁾ que resuelve el problema de una imperfección en donde además de cambiar la masa varía las constantes de interacción alrededor de ésta, usando un método numérico. Genzel et.al⁽¹⁶⁾ resuelven el problema de los modos resonantes (dentro de la rama acústica) en la cadena lineal con el mismo modelo de imperfección arriba mencionado. Para su análisis proponen una solución heurística. Bala et.al⁽¹⁷⁾ usan el método de fuerzas extras para resolver el problema planteado por Bjork, aunque con condiciones de frontera libres para los átomos extremos. Su cálculo al final se expresa en una forma numérica. Barker y Sievers⁽²⁾, también resuelven el problema anterior aunque no varían la masa del átomo, usando soluciones numéricas obtenidas en computadora. Munn⁽¹⁸⁾ analiza un cristal monoatómico con dos tipos de constantes de interacción (simula una red diatómica) y luego cambia una de ellas, obteniendo un modo localizado sobre la rama óptica o en la brecha prohibida, utiliza el método de la función de Green. Hemos mencionado algunos modelos de imperfección en la red diatómica con interacciones o primeros vecinos en los cuales se introducen cambios en las constantes de interacción. Recientemente este⁽¹⁹⁾ se ha introducido un modelo de imperfección en la red lineal que únicamente --

cambia una constante de interacción y este es el problema - que nos proponemos exponer en esta segunda parte del capítulo. Este modelo de imperfección es importante porque es un - modelo que no se había propuesto en la literatura y que nos enseñará cuál es el efecto del cambio en la constante de --- fuerza del cristal. Juega el papel análogo al modelo de im--- perfección que únicamente cambia la masa y completa la infor--- mación que conocemos de estos sistemas.

2.1. PLANTEAMIENTO Y SOLUCIÓN DEL PROBLEMA.

Nuevamente tenemos una red lineal infinita con dos ti--- pos de átomos de masas m y M con interacciones a vecinos cercanos entre ambas, colocadas y numeradas por celdas como se muestra en la figura 2.3 .

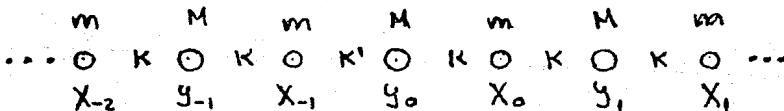


Figura 2.3.- Red lineal diatómica con una constante de interacción diferente entre un par de átomos.

K es la constante de fuerza para la interacción entre los átomos, excepto entre un par de ellos en donde la cons-

tante de interacción la denominaremos K' , estos átomos están colocados en las posiciones X_{-1} y Y_0 . Este es el modelo de imperfección que vamos a considerar.

Como el método que vamos a usar es el de las ecuaciones de diferencias y se va a resolver el problema como un problema de valor característico, necesitamos la solución general del sistema de ecuaciones (7) y (8). Además, queremos obtener los modos localizados, de manera que la solución que ocuparemos es la que nos describe este tipo de vibraciones. Lo conveniente es subdividir el intervalo de validez de las ecuaciones (7) y (8) en dos regiones para Y_u y X_u en donde la n tomará los siguientes valores: a) $0 \leq n \leq \infty$ y b) $-\infty \leq n \leq -1$. Usando la solución general ecuaciones (21) y (22) proponemos como solución del problema la siguiente:

$$\begin{aligned} Y_u &= C_1 E_1^n + C_2 E_2^n \\ X_u &= \left[\frac{E+1}{2-X} \right] Y_u \end{aligned} \quad 0 \leq n \leq \infty \quad (24)$$

$$\begin{aligned} Y_u &= C_3 E_1^n + C_4 E_2^n \\ X_u &= \left[\frac{E+1}{2-X} \right] Y_u \end{aligned} \quad -\infty \leq n \leq -1 \quad (25)$$

En la ecuación (24) C_1 y C_2 son constantes arbitrarias. También en la ecuación (25) lo son C_3 y C_4 .

Las condiciones a la frontera coinciden con las condiciones para tener modos localizados alrededor de la imperfección y las podemos escribir como sigue:

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow -\infty} y_n &\Rightarrow 0 & \text{y} & \lim_{n \rightarrow -\infty} X_n &\Rightarrow 0 \\ \lim_{n \rightarrow \infty} y_n &\Rightarrow 0 & \text{y} & \lim_{n \rightarrow \infty} X_n &\Rightarrow 0 \end{aligned}$$

Estas condiciones de frontera determinan el problema de valores propios, y como la solución que propusimos ecuaciones -- (24) y (25) deben satisfacer las condiciones de frontera, entonces los coeficientes C_2 y C_3 son cero. El valor de E que está incluido en las X_n es E_1 a la derecha de la imperfección y E_2 a la izquierda de ésta. Con lo anterior la solución que vamos a proponer en este caso será:

$$\begin{aligned} y_n &= C_1 E_1^n \\ X_n &= C_1 \left[\frac{E_1 + 1}{2 - X} \right] E_1^n & n \geq 0 & \quad (26) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} y_n &= C_4 E_1^{-n} \\ X_n &= C_4 \left[\frac{E_1 + 1}{2 - X} \right] E_1^{-(n+1)} & n \leq -1 & \quad (27) \end{aligned}$$

En las ecuaciones anteriores hemos usado el hecho de que $|E_1| < 1$ y que E_1 y E_2 son reciprocas. De nuevo las cons

* Se usará genéricamente $|E_1| < 1$ pero cabe señalar que para los modos de brecha si es E_1 la que es menor que uno cuando $\rightarrow \infty$, pero para los modos por arriba de la rama óptica la que es menor que uno es E_2 . Las ecuaciones siguen siendo las mismas solamente que E_2 sustituye a E_1 .

tantes C_1 y C_4 son determinadas por la unión apropiada de la solución en ambas regiones alrededor de la imperfección. Para esto necesitamos las ecuaciones de movimiento de los átomos m y M situados en X_{-1} y Y_0 respectivamente (ver figura 2.3) que podemos escribir

$$X_{-1} + Y_0 (\epsilon x \rho - \rho - 1) + \rho X_0 = 0 \quad (28)$$

$$\rho Y_{-1} + X_{-1} (x \rho - \rho - 1) + Y_0 = 0 \quad (29)$$

en donde $\rho = \frac{K}{K'}$.

Al sustituir la solución, ecuaciones (26) y (27), en (28) y (29) obtenemos:

$$C_4 (E_1 + 1) + C_1 \left[(\epsilon x \rho - \rho - 1)(2-x) + \rho(E_1 + 1) \right] = 0 \quad (30)$$

$$C_4 \left[\rho E_1 (2-x) + (E_1 + 1)(x \rho - \rho - 1) \right] + C_1 (2-x) \quad (31)$$

Las ecuaciones anteriores forman un sistema homogéneo de ecuaciones lineales con C_1 y C_4 como incógnitas, existe solución diferente de la trivial si el determinante del sistema es igual a cero.

$$\begin{vmatrix}
 (E_1 + 1) & [(\epsilon x \rho - \rho - 1)(2-x) + \rho(E_1 + 1)] \\
 \rho E_1 (2-x) + (E_1 + 1)(x \rho - \rho - 1) & (2-x)
 \end{vmatrix} = 0$$

Resolviendo el determinante anterior llegamos a la ecuación de segundo grado en E_1 ,

$$E_1^2 p(p-1) + E_1 [pb + a(p-1) + x - 2] + (ab + x - 2) = 0 \quad (32)$$

donde

$$b = (px - p - 1) \quad y \quad a = (\varepsilon xp - p - 1)(2 - x) + p$$

Las raíces de la ecuación (32) son:

$$E_1^{(1,2)} = \frac{-B \pm \sqrt{B^2 - 4AC}}{2A} \quad (33)$$

con

$$A = p(p-1)$$

$$B = pb + a(p-1) + x - 2$$

$$C = ab + x - 2$$

Sustituyendo en la ecuación (32) el valor de E_1 (ecuación (23)), en términos de X y ε , realizando el álgebra se llega a la ecuación de valores propios para las frecuencias

$$\begin{aligned}
& X^6 [\varepsilon^2 \rho^4 - 2\varepsilon^2 \rho^3] + X^5 [-6\varepsilon^2 \rho^4 + 12\varepsilon^2 \rho^3 - 2\varepsilon \rho^4 + 2\varepsilon \rho^2 \\
& + 4\varepsilon \rho^3 + 2\varepsilon^2 \rho^2] + X^4 [13\varepsilon^2 \rho^4 - 26\varepsilon^2 \rho^3 - 11\varepsilon^2 \rho^2 + 10\varepsilon \rho^4 \\
& - 20\varepsilon \rho^3 - 18\varepsilon \rho^2 + \rho^4 - 3\rho^2 - 2\rho^3] + X^3 [-12\varepsilon^2 \rho^4 \\
& + 24\varepsilon^2 \rho^3 + 20\varepsilon^2 \rho^2 - 16\varepsilon \rho^4 + 32\varepsilon \rho^3 + 56\varepsilon \rho^2 + 4\rho^4 \\
& + 8\rho^3 + 20\rho^2] + X^2 [4\varepsilon^2 \rho^4 - 8\varepsilon^2 \rho^3 + 12\varepsilon^2 \rho^2 + 8\varepsilon \rho^4 \\
& - 16\varepsilon \rho^3 - 72\varepsilon \rho^2 + 4\rho^4 - 8\rho^3 - 4\rho^2] + X [32\varepsilon \rho^2 - 32\rho^2] = 0 \\
& \dots\dots\dots(34)
\end{aligned}$$

Es fácil observar que la ecuación anterior tiene como raíces a $X=0$ y $X=2$ dos veces. Estas raíces corresponden a los modos con frecuencias de los orillos de las ramas las cuales no cumplen con la condición de localización, por lo tanto no se considerarán. Eliminando estas raíces de la ecuación (34) obtenemos

$$\begin{aligned}
& X^3 [\varepsilon^2 \rho(\rho-2)] + X^2 [2(\varepsilon^2 + \varepsilon)(-\rho^2 + 2\rho + 1)] \\
& + X [\varepsilon^2 + 1)(\rho^2 - 2\rho - 3) + 2\varepsilon(\rho^2 - 2\rho - 5)] + 8(\varepsilon + 1) = 0 \dots(35)
\end{aligned}$$

La ecuación (35) es la ecuación de las frecuencias de los modos localizados en función de los parámetros ε y ρ . En el siguiente capítulo se analizarán las condiciones bajo las cuales las soluciones de la ecuación (35) describen modos localizados.

C A P I T U L O I I I

ANÁLISIS DE LA ECUACION DE VALORES PROPIOS.

Aquí haremos el análisis detallado de la ecuación de valores propios (ecuación (35) del capítulo anterior), encontrando la frecuencia de los modos localizados existentes así como sus formas de vibración. Para comprender mejor el problema se harán comparaciones en los casos que sea necesario.

La ecuación (35) como ya se vió tiene como raíces a 0 , 2 y 2 ; para cualquier valor de ϵ y ρ , ésta se reduce a la ecuación (36) que es una ecuación de tercer grado y que es más sencilla y fácil de analizar, ahora la escribiremos nuevamente;

$$X^3[\epsilon^2\rho(\rho-2)] + X^2[2(\epsilon^2+\epsilon)(-\rho^2+2\rho+1)] \\ + X[(\epsilon^2+1)(\rho^2-2\rho-3) + 2\epsilon(\rho^2-2\rho-5)] + [8(\epsilon+1)] = 0 \quad (35)$$

Las raíces $X=0, 2, 2$ corresponden a dos de los extremos de las ramas que aparecen en el cristal limpio, ya que recordaremos que $X = \frac{m\omega^2}{k}$ y ahora los orilllos de las ramas son:

0 y $2/\epsilon$ para la rama acústica y 2 y $\frac{2(\epsilon+1)}{\epsilon}$ para la rama óptica, si $M > m$, si $M < m$ se invierten 2 y $2/\epsilon$.

2. COMPARACION DE LA GRAFICA DE X COMO FUNCION DEL
PARAVETRO ρ PARA TODA \mathcal{E}

a) Si $\rho = 1$

Al sustituir este valor en la ecuación (35) obtenemos lo siguiente

$$X^3(-\mathcal{E}^2) + X^2(4\mathcal{E}^2 + 4\mathcal{E}) + X(-4\mathcal{E}^2 - 4 - 12\mathcal{E}) + 8(\mathcal{E} + 1) = 0$$

Esta ecuación tiene como raíces a $X = 2, 2/\mathcal{E}$ y $\frac{2(\mathcal{E}+1)}{\mathcal{E}}$ estas raíces como ya vimos corresponden con las frecuencias límites de las orillas de las ramas en el cristal diatómico limpio y entonces el problema en cuestión se reduce a éste - en donde las formas de los modos normales de vibración se -- mostrarán en las figuras 2.2 y 2.3 del capítulo II.

En forma análoga podemos hacer notar que no importa el valor que se le de a \mathcal{E} , siempre las soluciones van a llegar o a salir de los orillos de las ramas en $\rho = 1$; en la -- ecuación (35) se le darán a X los siguientes valores: 2 $\frac{2}{\mathcal{E}}$ y $\frac{2(\mathcal{E}+1)}{\mathcal{E}}$ por separado y analizamos las ecuaciones resultantes.

a.1) Caso $X = 2$

Si $X = 2$ la ecuación (35) se reduce a una ecuación de -- segundo orden en ρ :

$$\rho^2(-2\mathcal{E} + \mathcal{E}^2 + 1) + \rho(-2\mathcal{E}^2 + 4\mathcal{E} - 2) + (\mathcal{E}^2 - 2\mathcal{E} + 1) = 0$$

$$o \quad (\varepsilon - 1)^2 (\rho - 1)^2 = 1$$

esta ecuación tiene como raíces a $\rho = 1$ que es una raíz doble, en el caso $\varepsilon \neq 1$ que es el caso del cristal diatómico.

a.2) Caso $X = \frac{2}{\varepsilon}$

De nuevo sustituyendo el valor de X en la ecuación - (35) obtenemos la misma ecuación que en el caso anterior en términos de ρ , con la raíz doble 1.

a.3) Caso $X = \frac{2(\varepsilon + 1)}{\varepsilon}$

Obtenemos la ecuación siguiente:

$$(\varepsilon + 1)^3 (\rho - 1)^2 = 0$$

que evidentemente tiene como raíz doble a 1, ya que $\varepsilon \neq -1$.

De lo anterior vemos que en los tres casos $\rho = 1$ es una raíz doble, por lo tanto, hemos encontrado que en la gráfica de la frecuencia como función de ρ , siempre la función -- empieza o termina en $\rho = 1$.

b) Caso $\rho = 0$

Si $\rho = 0$ la ecuación (35) se reduce a una ecuación de -- segundo grado en X :

$$X^2 [2\varepsilon(\varepsilon + 1)] + X [-3(\varepsilon^2 + 1) - 10\varepsilon] + 8(\varepsilon + 1) = 0 \quad (36)$$

Como una ecuación de tercer grado se reduce a una de segundo

grado una de las raíces es $X = \infty$ y esta raíz no es físicamente aceptable. La ecuación (36) tiene como raíces a

$$X_{+,-} = \left[\frac{-B \pm \sqrt{B^2 - 4AC}}{2A} \right] \quad (37)$$

donde

$$A = 2\varepsilon(\varepsilon + 1) \quad ; \quad B = -3(\varepsilon^2 + 1) - 10$$

$$C = 8(\varepsilon + 1)$$

Tenemos dos valores de X que siempre se encuentran en la brecha prohibida del cristal largo, en cuanto a $X = \infty$ quiere decir que tenemos una curva por arriba de la rama óptica que no cruza al eje en donde se están graficando los valores de X sino que es asintótica a éste.

c) Caso $\rho = \infty$

Si $\rho = \infty$ la ecuación (36) se reduce a:

$$X^3[\rho^2 \varepsilon^2] - X^2[2\rho^2 \varepsilon(\varepsilon + 1)] + X[\rho^2(\varepsilon^2 + 1) + 2\varepsilon\rho^2] = 0 \quad (38)$$

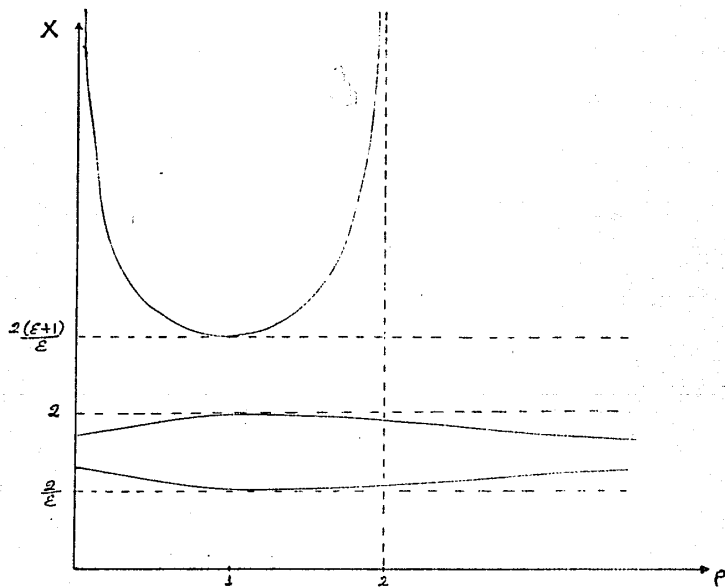
Como esta ecuación no tiene término independiente una de las raíces es $X = 0$ que corresponde a la frecuencia del límite inferior de la rama acústica y la ecuación (38) se reduce a una ecuación de segundo grado

$$X^2 \varepsilon^2 - X [2\varepsilon(\varepsilon + 1) + (\varepsilon^2 + 1) + 2\varepsilon\rho^2] = 0$$

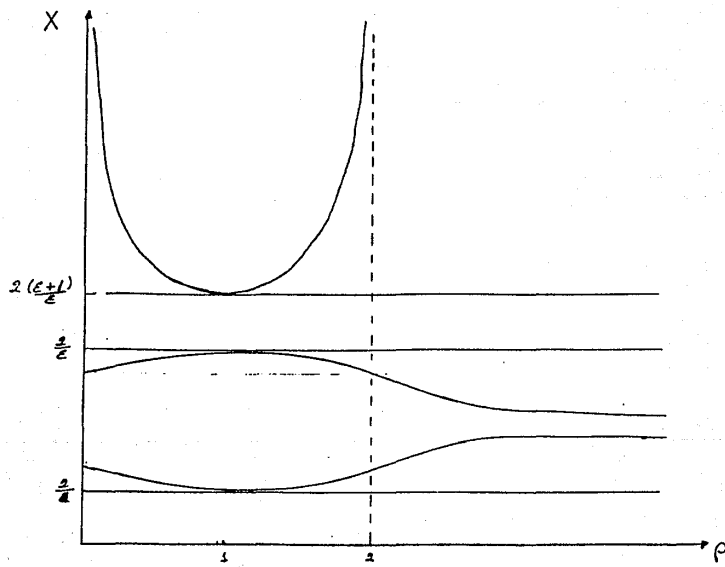
Esta ecuación tiene como raíz doble a

$$X = \frac{\varepsilon + 1}{\varepsilon}$$

Tomando en cuenta todo lo anterior podemos trazar las siguientes gráficas 3.1 y 3.2 que muestran el comportamiento de X o de la frecuencia de vibración como función del parámetro ρ , pero sin tomar en cuenta las condiciones de frontera para seleccionar los modos localizados.



Gráfica 3.1.- Gráfica de la ecuación (3) que nos da X como función del parámetro ρ si $\epsilon > 1$.



Gráfica 3.2.- Gráfica de la ecuación (36) en donde tenemos a X como función del parámetro ρ si $\epsilon < 1$.

3. SOLUCIONES PARA LOS MODOS LOCALIZADOS

Las gráficas 3.1 y 3.2 nos muestran que al variar los parámetros ϵ y ρ se encuentran diferentes valores de X que son soluciones de la ecuación de eigenvalores para la frecuencia. Ahí todavía no hemos tomado en cuenta -- las condiciones de frontera del problema para obtener los modos localizados. A continuación veremos qué valores son adecuados.

En primer lugar aquellos valores de X negativos -- darán frecuencias con lejas, por lo tanto con esas frecuencias no hay modos normales de vibración y los descartamos. Para verificar si los valores de X positivos sirven también necesitamos los valores de las constantes C_1 y C_4 para esto nos regresamos a las ecuaciones (30) y (31) -- que como ya se dijo forman un sistema de ecuaciones lineales homogéneas. Fijemos el valor de C_1 y determinemos a C_4 en términos de C_1 en ambas ecuaciones; de la -- ecuación (30) del capítulo anterior tenemos:

$$C_4 = \frac{-[(\epsilon X - \rho - 1)(2 - X) + \rho(E_1 + 1)]C_1}{(E_1 + 1)} \quad (39)$$

y de la ecuación (31) :

$$C_4 = \frac{-(2 - X) C_1}{[\rho E_1(2 - X) + (E_1 + 1)(X\rho - \rho - 1)]} \quad (40)$$

Con lo anterior que era lo que faltaba ya podemos saber que valores de X positivos cumplen con todas las condiciones de frontera del problema y por lo tanto trazar la gráfica de la frecuencia de los modos de vibración localizados en función del parámetro ρ . Los valores de X deben cumplir lo siguiente: 1.- X debe ser mayor que cero ($X > 0$); 2.-El valor absoluto de E_1 ó E_2 según sea el caso debe ser menor que uno ($|E_1| < 1$ ó $|E_2| < 1$) y para esto nos regresamos a la ecuación (33), de aquí obtenemos dos valores de E_1 , si los dos sirven continuamos con lo siguiente con cada valor por separado; 3.-Las ecuaciones (39) y (40) deben ser iguales numéricamente al sustituir los valores de ϵ, ρ, X y E_1 ; si esto no sucede quiere decir que las ecuaciones de movimiento de los átomos perturbados por la imperfección no se están cumpliendo y no se puede seguir adelante; 4.-Teniendo el valor de X, E_1, ρ_4 y ρ_1 que la utilizamos para normalizar, podemos conocer los valores de los desplazamientos X_u y Y_u de acuerdo a las ecuaciones (26) y (27) y verificar si las soluciones se amortiguan o sea la condición de localización; 5.-Concentrando los valores de los desplazamientos X_u y Y_u por último tenemos que verificar si las ecuaciones de movimiento para los demás átomos de la red --

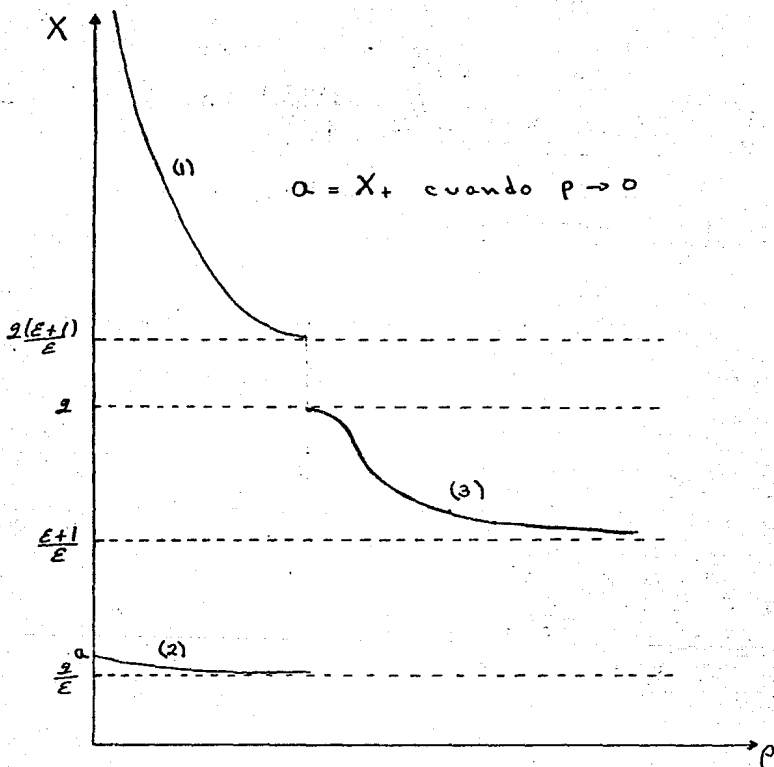
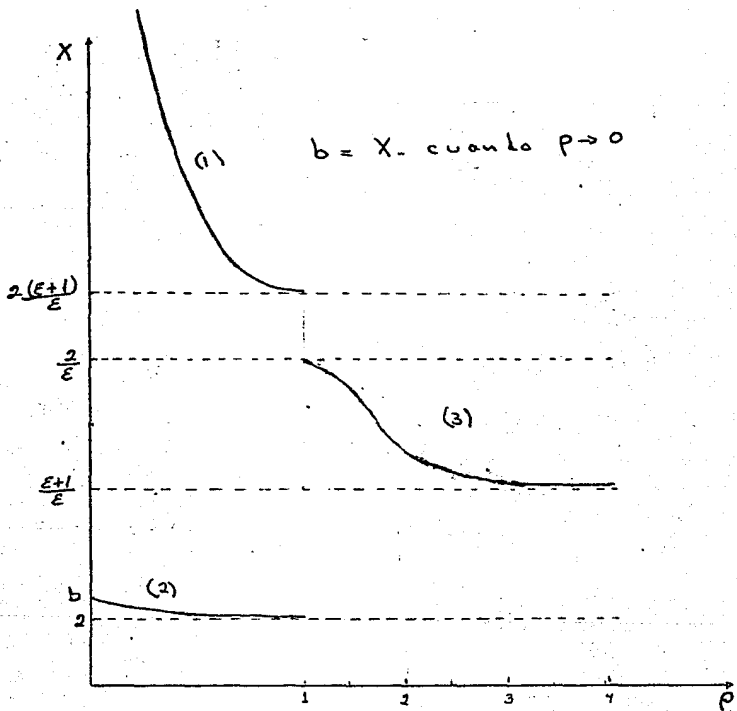


Gráfico 3.3.- Frecuencias de los modos normales de vibración localizados en función del parámetro ρ cuando $E > 1$.



Gráfica 3.4.- Frecuencia de los modos normales de vibración localizados en función del parámetro ρ cuando $E < 1$.

también se cumplen.

Dado un valor de ϵ y ρ , sustituyendo en la ecuación (35) encontramos los valores de X y siguiendo con todas las condiciones anteriores podemos eliminar algunos valores de X de las gráficas 3.1 y 3.2. Las gráficas 3.3 y 3.4 nos muestran los valores de la frecuencia de los modos de vibración localizados en función del parámetro ρ para $\epsilon > 1$ y $\epsilon < 1$ respectivamente. Las frecuencias de las orillas de las ramas no cumplen la condición de localización ya que E_i es igual a 1.

En las figuras 3.1, 3.2 y 3.3 se muestra la forma de los modos normales de vibración en las diferentes regiones de frecuencias y para diferentes valores de ρ .

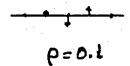
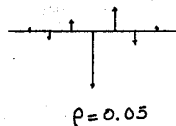
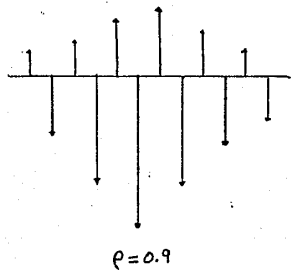
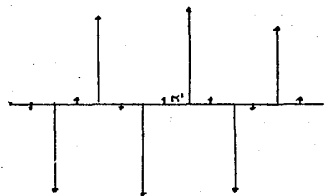
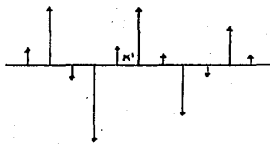


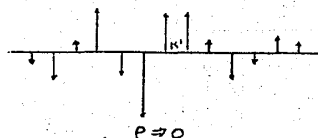
Figura 3.1.- Evolución de la forma de los modos localizados en la región de frecuencias (1) de la gráfica 3.3 como función del parámetro ρ .



$\rho=0.9$



$\rho=0.5$



$\rho=0$

Figura 3.2.- Evolución de la forma de los modos localizados en la región de frecuencias (2) de la gráfica 3.3 como función del parámetro ρ .

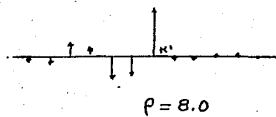
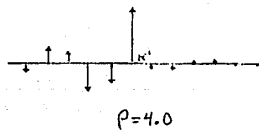
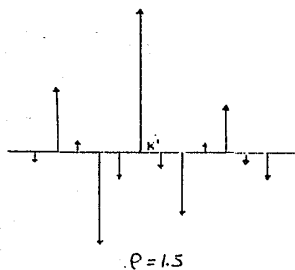


Figura 3.3.- Evolución de la altura de los modos localizados en la región de frecuencias (ω) de la gráfica 3.2 como función del parámetro ρ .

RESULTADOS .-

Analizando las gráficas 3.3 y 3.4 podemos decir que no importa el valor de M y m siempre que $\rho > 1$ o lo que es lo mismo $K' > K$ existen dos modos localizados, a uno lo llamaremos modo de brecha I y al otro modo local, ya que uno se encuentra en la brecha prohibida y el otro por arriba de la rama óptica. Si $\rho > 1$ o $K' < K$, solamente se encuentra un modo localizado en la brecha prohibida y lo llamaremos modo de brecha II y además si ρ se hace muy grande este modo -- tiende a tener una frecuencia como la de un modo de superficie⁽²⁰⁾.

La frecuencia del modo local (región I) decrece conforme la interacción K' disminuye y cuando se iguala a K (cristal limpio) la frecuencia toma el valor de la del límite superior de la rama óptica. En cuanto a la forma del modo local, cuando K' tiende a K la forma de este modo va tendiendo a la forma del modo con una frecuencia igual al límite superior de la rama óptica (figura 2.3) en donde vibran los dos átomos de diferente masa en cierta proporción; conforme la interacción K' se va haciendo más fuerte el modo se va localizando más alrededor de la imperfección, esto se muestra en la figura 3.1 .

La frecuencia del modo de tracheo también decrece aunque no en la misma proporción que en el caso anterior sino en forma más lenta; cuando $\rho=0$ tiene un valor finito que se encuentra usando la ecuación (38) en donde X_+ vale para -- cuando la relación de masas es mayor que uno ($\epsilon > 1$) y X_- cuando dicha relación es menor que uno ($\epsilon < 1$), conforme la ρ va en aumento hasta llegar a 1, la frecuencia de este modo tiende a la frecuencia del límite superior de la rama acústica. En cuanto a la forma se puede observar en la figura 3.2 que al acercarse al límite superior de la rama acústica los átomos vibran de la misma forma que en la figura 2.2c en donde los átomos que se localizan son los más pesados y los ligeros tienden a quedarse en reposo, de la figura 3.2 se puede observar que el crecimiento de la constante de interacción (K') entre los dos átomos produce los efectos, por un lado por lo que los átomos pequeños vibran con desplazamientos diferentes de cero alrededor de la posición de equilibrio pero el átomo pesado produce localización en la vibración. Nótese en la figura 3.2 que para valores de $\rho=0.5$, la constante de interacción es del orden de la constante de interacción del cristal límite, esta vibración es más localizada y el desplazamiento de la rama acústica es más grande.

Un comportamiento aparentemente extraño sucede para el caso $\rho=0$, es decir, $K'=\infty$; para este caso se puede mencionar que los dos átomos unidos por la constante de interacción diferente vibran con la misma amplitud; como la fuerza de interacción entre ambos es del tipo ley de Hooke se observa que en este tipo de vibración no hay desplazamiento relativo de manera que aunque se tenga un valor de la constante de interacción muy alto existe una fuerza de interacción finita. Esta vibración es comparable al efecto que produce una masa pequeña y diferente en una red diatómica cuando la masa se hace cero (21).

En cuanto a la frecuencia del modo de breche II que se encuentra cuando la constante de interacción $K' < K$, también disminuye y cuando se agudizan las interacciones la frecuencia encontrada es la del límite inferior de la rama óptica, y al hacerse la interacción K' cada vez más débil ($\rho \rightarrow \infty$) esta frecuencia, como ya se dijo, va disminuyendo hasta llegar a la frecuencia del modo de superficie⁽²⁰⁾ que es $\frac{g+1}{\epsilon}$. Por tanto, cuando $\rho=1$ la frecuencia es la frecuencia del límite inferior de la rama óptica y la fuerza de los modos tienden a vibrar como en la figura 2.3a, en donde ahora los átomos que se desplazan son los más ligeros (ver figura 3.3). Por otro

lado, la forma de este modo cuando K' se hace muy débil ($\rho \rightarrow \infty$) como la frecuencia tiende a la frecuencia del modo de superficie, es de la misma forma que estos, cuando M representa la masa ligera los átomos de la izquierda no vibran, sino solamente los que están a la derecha de la imperfección y cuando m es la masa más ligera entonces los átomos de la derecha no se desplazan y los de la izquierda sí, esto se ve en la figura 3.3.

Al cambiar la relación de masas siguen apareciendo el mismo número de modos de vibración localizados con un comportamiento similar al cambiar las interacciones.

Otro resultado interesante es el caso cuando $\epsilon = 1$ o sea regresando a la red monoatómica unidimensional infinita; si se sustituye este valor de ϵ en la ecuación (35) se obtiene:

$$X^3 [P(P-2)] + X^2 [-4P^2 + 8P + 4] + X [2P^2 - 6P - 16] + 16 = 0$$

la cual tiene como raíces $X = 2, 2$ y $\frac{4}{P(2-P)}$

los dos primeros raíces no cumplen condiciones de frontera ya que en este caso se encuentran dentro de la zona acústica del cristal monoatómico perfecto y la tercera cumple con todas las condiciones de frontera del problema. Si lo comparamos con la ecuación (19) del capítulo I se encuentran que en

exactamente la misma solución que se encontró al analizar la red monoatómica con imperfección. La gráfica sigue siendo la misma (gráfica 1.2) y la forma de dicho modo también lo es, con lo cual se asegura que el problema de la red diatómica - con imperfección expuesto en el capítulo anterior y en éste ha sido completamente analizado y se han obtenido resultados satisfactorios ya que por un lado se puede regresar al cristal diatómico limpio y por otro lado se reduce al cristal monoatómico con una sola constante de interacción diferente.

CONCLUSIONES.-

En el primer capítulo se analizó la red lineal monoatómica infinita en donde se encontraron resultados que se compararon con los obtenidos por diferentes autores, también se estudió la red lineal monoatómica con una constante de interacción diferente, encontrándose solamente un modo localizado en la región prohibida, siempre y cuando la constante de interacción diferente fuera más grande que la constante de interacción de la red. Se mostró que este resultado concuerda con el encontrado por Montroll y Potts⁽¹⁰⁾ usando la función de Green. También coincide con el obtenido por el método de la onda reflejada⁽¹¹⁾.

En el segundo capítulo se resolvió la red diatómica infinita perfecta y los resultados encontrados son los que ya se conocían. El análisis de la red diatómica unidimensional infinita con una constante de interacción diferente, que es el motivo principal de este trabajo, se terminó en el capítulo III y se encontró lo siguiente: El número total de modos de vibración localizados es tres, uno local y dos de brecha con formas diferentes pero cualquier valor de la constante de interacción K' pero siempre en las regiones prohibidas.

bidas del cristal perfecto. Se encuentran otras soluciones - que no satisfacen condiciones de frontera pero nunca dentro de las ramas permitidas de la red diatómica perfecta. Además, cuando la interacción K' se hace muy débil se recupera el caso de superficie en donde sólo existe modo localizado si la masa más ligera se encuentra en la superficie, este problema fue analizado por Wallis y por Horí y Asahi⁽²⁰⁾. Por tanto la superficie de un cristal puede ser analizada como un tipo especial de defecto considerando por ejemplo una red diatómica con igual número de átomos ligeros y pesados alternados y con condiciones a la frontera cíclicas impuestas y tomando una constante de interacción que tienda a cero, este caso se convierte en una red diatómica alternada con extremos libres y la constante de interacción que tiende a cero constituye el defecto. En este trabajo se ha comprobado lo anterior que fué lo que propuso Wallis⁽²⁰⁾ al final de su trabajo.

Lo que se hizo en este trabajo no es algo que se quiera comparar con el experimento sino que más bien era una inquietud de por qué se había resuelto el problema de la red lineal monatómica con constante de fuerza diferente y éste no. Además el hacer ver que el método de las ecuaciones de dife-

rencia es una herramienta matemática con menor grado de complejidad que todos los demás, y si este problema no se encuentra resuelto en la literatura, por que no resolverlo y a la vez mostrar el método que ha utilizado el grupo de Física de Superficies de la Facultad de Ciencias y además con resultados satisfactorios en el análisis de modelos vibracionales con imperfecciones.

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

- 1.- A. A. Maradubini, in Solid State Phys. 12, (1966).
- 2.- A. S. Barker, Jr. and A. J. Sievers, Rev. Mod. Phys. 47, suppl. 2 Fall. (1975).
- 3.- R. Fieschi, G. F. Nardelli, and N. Terzi, Phys. Rev. 138, A203 (1965); J. B. Page Jr. and D. Strauch, phys. stat. sol. 24, 469 (1967); G. Benedek and G. F. Nardelli, Phys. Rev. 155, 1004 (1967); S. P. Gaur, J. F. Vetolino and S. S. Mitra, J. Phys. Chem. Solids., 32, 2737 (1971); D. N. Talwar and Bal. K. Agrawal, Phys. Rev., 12, 1432 (1975); M. Vandevyver and P. Plumelle, Phys. Rev., B17, 675 (1978) M. Vandevyver and P. Plumelle, J. Phys. Chem. Solids., 38, 765 (1977); E. Jahne, P. Kleinert, B. Kh. Bairamov and V. V. Toporov, phys. stat. sol. (b) 104, 531 (1981).
- 4.- L. Andrade, in Recent Progress in Many Body Theories, --- Springer-Verlag (Berlin, Heidelberg, New York) 142, 309 (1981).
- 5.- J. P. McKelvey, Física del Estado Sólido y de Semiconductores, Ed. Limusa.
- 6.- A. J. Dekker, Solid State Physics, Ed. Prentice Hall Inc.

- 7.- J. Kittel, Introducción a la Física del Estado Sólido, --
Ed. Reverté.
- 8.- L. Brillouin, Wave Propagation in Periodic Structures, --
Ed. Dover Publications, Inc. New York, (1953).
- 9.- L. Andrade. To be published.
- 10.- E. W. Montroll and R. B. Potts, Phys. Rev. 100, 525 ----
(1955).
- 11.- L. Andrade y J. Borax, Bol. Sos. Mex. Fis. No. 4, 190 --
(1975).
- 12.- L. Andrade, Internal Report. Facultad de Ciencias, UNAM -
Winter 1960 (unpublished).
- 13.- L. Andrade. Reprint. FACUNAM (1986).
- 14.- A. Miranda G. Tesis Profesional. Facultad de Ciencias --
UNAM (1981) (no publicada),
- 15.- R. L. Bjork, Phys. Rev., 105, 456 (1957).
- 16.- I. Genzel, K. F. Renk and R. Webber, Phys. Stat. Sol., 12
636 (1965).
- 17.- S. Bala, D. P. S. Malik and A. K. Ghatak, J. Phys. Chem.
Solids., 33, 1985 (1972); S. Bala, D. P. S. Malik and A.
k. Ghatak, Phys. Letters 34A, 179 (1972).
- 18.- R. W. Munn, J. Chem. Phys., 52, 64 (1970).

- 19.- G. Olguin y L. Anarade, Bol. Cos. Mex. Fis. No. 5, 11 -
(1984); L. Anarade. Reprint. F. UNAM (1986).
- 20.- R. F. Wallis, Phys. Rev., 105, 540 (1957); J. Hori and
T. Asahi. Progr. Theo. Phys., 31, No. 1 (1964).
- 21.- P. Mazur, S. W. Kortrell and R. B. Potts, J. Wash. Acad.
Sci., 46, 2 (1956).