

5
20/7



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

MODOS LOCALIZADOS EN LA
RED DE HORI Y ASAHI

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

MIGUEL CRUZ IRISSON

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

México, D. F.

Julio de 1990.



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.

CONTENIDO

INTRODUCCION.	1.
CAPITULO I. CALCULO DE LAS FRECUENCIAS USANDO EL METODO DE LA MATRIZ DE TRANSFERENCIA.	5.
CAPITULO II. FORMULACION Y SOLUCION DEL PROBLEMA.	25.
CAPITULO III. ANALISIS DE FRECUENCIAS Y FORMAS DE LOS MODOS VIBRACIONALES LOCALIZADOS.	50.
CONCLUSIONES.	76.
BIBLIOGRAFIA.	78.

INTRODUCCION

Se sabe, que las impurezas dentro de los cristales son las responsables de algunas propiedades de los semiconductores, de los halogenuros alcalinos, etc. En particular algunos de los espectros de emisión y absorción óptica están relacionados con las transiciones de los electrones en sus estados de energía de la red. Otras cuyas frecuencias se encuentran localizadas en el cercano infrarrojo, se deben a los cambios de los estados vibracionales de los átomos de la red. Son estos últimos los que a nosotros nos interesa estudiar en este trabajo. En este caso se debe analizar, la interacción de la radiación con los fonones de la red⁽²⁾. Estos fenómenos se explican utilizando una serie de modelos en donde el cristal es representado con toda la complejidad de sus átomos, conjuntamente con los electrones y de las interacciones que en ellos se tienen. Los cálculos realizados con estos modelos, son extraordinariamente complicados⁽³⁾. Algunos físicos teóricos, siempre han sido atraídos a problemas unidimensionales, por dos razones principalmente: una, que ellos pueden ser exactamente solubles, o también porque ciertos efectos son claramente mostrados en una dimensión. Una referencia del estado del arte en estos sistemas fué editada por Lieb y Mattis⁽⁴⁾. Sin embargo, desde el descubrimiento de los sistemas quasi-dimensionales, este trabajo ha llegado a ser muy interesante para los físicos experimentales, esta situación ha permitido la edición de un nuevo volumen para poner más al día el trabajo antes mencionado⁽⁵⁾.

Desde que Schaefer⁽⁶⁾ mostró en 1960 la existencia de un pico muy fuerte, en el espectro de absorción vibracional de los halogenuros alcalinos, en la región del infrarrojo, cuando estos contenían iones H^- , que se colocaban sustitucionalmente en la subred del ión negativo y los cuales él atribuyó a la absorción por modos localizados, se desataron toda una serie de experimentos que también abarcaban a muchos otros tipos de cristales. Una referencia importante para resumir todos estos experimentos es la que editaron Barker y Sievers⁽⁷⁾.

El estudio teórico de los modos vibracionales localizados, empezó en 1943 con Lifshitz⁽⁸⁾, quien utilizó métodos perturbacionales con la función de Green para el tratamiento de estos problemas. Desde esa época se han publicado una veintena de diferentes métodos heurísticos, para calcular las frecuencias de estos modos vibracionales localizados en modelos unidimensionales. Un resumen de toda esta bibliografía aparece en un trabajo reciente⁽⁹⁾.

El modelo de red y de imperfección que analizaremos en esta tesis fué propuesto por Barker y Sievers⁽⁷⁾ para estudiar cristales con estructura Zinc-Blenda (como el fosforo de galio el cual no tiene centro de inversión). Este tipo de red ya había sido utilizada unos años antes que Barker y Sievers por Horí y Asahi⁽¹⁰⁾, quienes utilizando el método de la matriz de transferencia intentaron calcular las frecuencias de los modos vibracionales localizados que

se producen en esta red, cuando a ella se le incorpora una masa substitucional isotópica, es decir, una impureza. Sin embargo, ellos estudiaron el caso en que las dos masas de los átomos son aproximadamente iguales y además las constantes de los resortes las hicieron muy cercanas entre sí. Es por esta razón que en este trabajo de tesis, se estudiarán las frecuencias así como las formas, de los modos normales de oscilación en un modelo de red diatómica lineal infinita con dos constantes de Hooke, con interacciones a primeros vecinos, cuando es sustituido un átomo de la red por un átomo impureza de manera isotópica, teniendo éste una masa diferente a la del átomo reemplazado. El método que nosotros vamos a utilizar aquí será el de diferencia finita⁽¹⁾.

Partiendo de esta problemática, este trabajo se ha organizado de la siguiente manera: En el primer capítulo, se ilustra el método de la matriz de transferencia, en la solución de algunos ejemplos sencillos de redes lineales, ya que ésta fue la técnica matemática utilizada por Hori-Asahi.

En el segundo capítulo se calculan las frecuencias y las formas de los modos vibracionales localizados en la cadena de Hori y Asahi, cuando incorporamos en ella una impureza isotópica como ya mencionamos antes. Para realizar este trabajo usaremos la técnica de diferencia finita. En la primera parte hicimos un resumen de la red perfecta y obtuvimos además la solución del problema antes mencionado. Para la segunda parte dejamos el análisis de la cadena

diatómica con interacción a primeros vecinos con una sola constante de fuerza y una masa isotópica contenida en ella. Así también como el análisis de la red monoatómica con una constante de fuerza con interacciones a primeros vecinos y una masa impureza isotópica.

En el tercer capítulo se analiza con todo detalle el caso de una cadena monoatómica con dos constantes de fuerza y una masa isotópica, y finalmente se discute ampliamente el problema planteado por Horí y Asahi.

Por último escribimos algunas conclusiones de este trabajo.

CAPITULO I

El propósito de este capítulo es presentar el trabajo realizado por Hori y Asahi quienes usando el método de la matriz de transferencia, calculan las frecuencias de los modos normales de vibración, de una cadena diatómica infinita con dos constantes de interacción y una impureza. En la primera parte se calcula la matriz de transferencia para una red monoatómica lineal con interacción a vecinos más cercanos; después se analiza una red diatómica lineal con dos constantes de interacción. En la segunda parte se calculan las frecuencias de las vibraciones localizadas en los dos tipos de cadenas anteriores, cuando se sustituye en alguno de los átomos de cada red un átomo impureza. Además se utiliza la misma notación que usaron Hori y Asahi.

Consideremos una cadena monoatómica con una constante de interacción, compuesta de N átomos igualmente espaciados. Sea m la masa de cada uno de los átomos, y λ la constante de fuerza a primeros vecinos entre átomos adyacentes.

La ecuación de movimiento para el i -ésimo átomo es:

$$m \frac{d^2 X_i}{dt^2} = -\lambda \left[(X_i - X_{i-1}) + (X_i - X_{i+1}) \right] \dots \dots \dots (1.1)$$

con $i = 1, 2, \dots, N$.

donde x_i es el desplazamiento relativo a la posición de equilibrio del i -ésimo átomo. Se propone una solución de la forma

$$x_i = x_i \exp(\pm j\omega t)$$

la cual se sustituye en la ecuación (1.1) obteniéndose

$$-m\omega^2 x_i = \lambda (x_{i-1} - x_i + x_{i+1} - x_i), \dots \dots \dots (1.2)$$

Se introduce una nueva variable $y_i = x_{i+1} - x_i$, con la cual al sustituirla en la ecuación anterior se obtiene

$$-m\omega^2 x_i = \lambda (y_i - y_{i-1}), \dots \dots \dots (1.3)$$

Combinando esta ecuación con la definición de y_i , se obtiene un sistema de dos ecuaciones

$$x_{i+1} = x_i + y_i$$

$$m\omega^2 x_{i+1} + \lambda y_{i+1} = \lambda y_i$$

que se pueden escribir en forma matricial de la siguiente manera

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ m\omega^2 & \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{i+1} \\ y_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_i \\ y_i \end{pmatrix}$$

multiplicando ambos lados por $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ m\omega^2 & \lambda \end{pmatrix}^{-1} = \frac{1}{\lambda} \begin{pmatrix} \lambda & 0 \\ -m\omega^2 & 1 \end{pmatrix}$

se obtiene

$$X_{i+1} \equiv \begin{pmatrix} x_i \\ y_{i+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -m\omega^2/\lambda & 1 - m\omega^2/\lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_i \\ y_i \end{pmatrix} \equiv (I + T)X_i$$

Es decir $X_{i+1} = (I + T)X_i$,(1.4)

donde I es la matriz unidad. Como se puede observar, el movimiento de la red puede ser descrito en términos de una "matriz de transferencia" $I + T$, la cual transforma el "vector estado" X_i de un átomo en el vector de estado X_{i+1} del próximo átomo.

Proponiendo

$$\omega^2 = \left(\frac{4\lambda}{m}\right) \text{sen}^2\beta$$

se tiene

$$I + T = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -4\text{sen}^2\beta & 1 - 4\text{sen}^2\beta \end{pmatrix}$$

Para obtener los valores característicos de la matriz $I+T$, se hace

$$\det(I + T - \lambda' I) = 0, \quad \text{con } \lambda' \text{ el valor característico.}$$

Calculando el determinante se obtiene

$$\lambda'^2 + 2(2\text{sen}^2\beta - 1)\lambda' + 1 = 0.$$

resolviendo para $\lambda'_{1,2} = \exp(\pm 2i\theta)$

los valores característicos para T son

$$\lambda_{1,2} = \lambda_{1,2}^* - 1$$

o bien $1 + \lambda_{1,2} = \exp(\pm 2i\beta)$,(1.5)

Para diagonalizar la matriz T se utiliza una transformación de semejanza. Las matrices que diagonalizan a T son U y U⁻¹ y están dadas por

$$U = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ \lambda_1 & \lambda_2 \end{bmatrix}, \text{ y } U^{-1} = \frac{1}{\lambda_2 - \lambda_1} \begin{bmatrix} \lambda_2 & -1 \\ -\lambda_1 & 1 \end{bmatrix}, \dots\dots(1.6)$$

Así entonces

$$U^{-1} T U = \Lambda \equiv \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2) \dots\dots\dots(1.7)$$

Es claro que si $\lambda_2 = \lambda_1$ la matriz U⁻¹ no existe.

Al tomar en cuenta el hecho de que la red está sujeta a una condición de frontera cíclica, para no tomar en cuenta los problemas del final de la cadena, hacemos $X_{N+1} = X_1$. Entonces si

$$X_{N+1} = H X_1$$

es necesario que se cumpla que el

$$\det(H - I) = 0, \dots\dots\dots(1.8)$$

En el presente caso

$$H = (I + T)^N$$

Esto resulta de aplicar la matriz de transferencia I+T a los N

átomos de la cadena.

Debido a que

$$\det(I + T) = 1, \quad \text{y a que} \quad H = (I + T)^N$$

entonces $\det H = \det[(I + T)(I + T) \dots (I + T)]$, n -veces

como $\det H = 1$, junto con la ec.(1.8) se obtiene $H = I$

y por lo tanto $\text{traza } H = 2$,(1.9)

proporciona la ecuación de valores característicos para la frecuencia ω . Debido a que

$$U^{-1} T U = \Lambda$$

entonces

$$I + T = U(I + T)U^{-1}$$

$$(I + T)^N = U(I + \Lambda)U^{-1}$$

así

$$\text{traza } H = \text{traza } (I + T)^N = \text{traza} [(I + \Lambda)U^{-1}]$$

$$= \text{traza} [UU^{-1} (I + \Lambda)^N]$$

$$= \text{traza}(I + \Lambda)^N$$

Utilizando la ec.(1.5) se tiene

$$\text{traza } H = \text{traza}(I + \Lambda)^N = (1 + \lambda_1)^N + (1 + \lambda_2)^N$$

$$= \exp(2iN\beta) + \exp(-2iN\beta)$$

$$= 2\cos(2N\beta)$$

pero con la ec.(1.9), se obtiene

$$\cos 2N\beta = 1, \dots\dots\dots(1.11)$$

Entonces los valores característicos para las frecuencias están dados por

$$\omega^2 = \left(\frac{4\lambda}{m}\right)\text{sen}^2\left(\frac{n\pi}{N}\right), \dots\dots\dots(1.12)$$

$$n = 1, 2, \dots, N/2 \text{ para } N \text{ par}$$

$$n = 1, 2, \dots, (N-1)/2, \text{ para } N \text{ impar}$$

el resultado anterior es bien conocido⁽¹¹⁾.

En un segundo ejemplo de la aplicación del método de la matriz de transferencia consideraremos una cadena diatómica con dos constantes de interacción a primeros vecinos como se ilustra en la siguiente figura

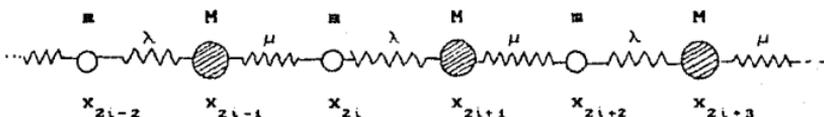


Figura 1.1 Cadena diatómica con dos constantes de interacción.

M es la masa de los átomos en la posición impar, y m es la masa de los átomos en la posición par. El número para cada tipo de átomos es N , y hemos denotado por λ y μ a las dos constantes de interacción.

Las ecuaciones de movimiento para las masas m y M son respectivamente

$$-m\omega^2 x_{2l} = -\lambda(x_{2l} - x_{2l+1}) - \mu(x_{2l} - x_{2l-1}), \dots\dots\dots(1.13)$$

$$-M\omega^2 x_{2l+1} = -\lambda(x_{2l+1} - x_{2l}) - \mu(x_{2l+1} - x_{2l+2}), \dots\dots\dots(1.14)$$

nuevamente se introduce la variable

$$y_{2l} = x_{2l+1} - x_{2l}, \dots\dots\dots(1.15)$$

Reescribiendo la ecuación de movimiento para los átomos de masa m , ec.(1.13), se tiene

$$x_{2l} = x_{2l-1} + y_{2l-1}$$

$$y_{2l} = -\frac{m\omega^2}{\lambda} x_{2l-1} + \left(\frac{\mu}{\lambda} - \frac{m\omega^2}{\lambda}\right) y_{2l-1}$$

las ecuaciones anteriores pueden escribirse en forma matricial de la siguiente forma

$$\begin{pmatrix} x_{2l} \\ y_{2l} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -\frac{m\omega^2}{\lambda} & \frac{\mu}{\lambda} - \frac{m\omega^2}{\lambda} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{2l-1} \\ y_{2l-1} \end{pmatrix}$$

Sean

$$I + T_1 = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -\frac{M\omega^2}{\lambda} & \frac{\mu}{\lambda} - \frac{M\omega^2}{\lambda} \end{bmatrix}, \quad X_{2l} = \begin{bmatrix} x_{2l} \\ y_{2l} \end{bmatrix}, \quad X_{2l-1} = \begin{bmatrix} x_{2l-1} \\ y_{2l-1} \end{bmatrix}$$

entonces

$$X_{2l} = (I + T_1)X_{2l-1}, \dots \dots \dots (1.16)$$

De la misma manera las ecuaciones (1.14) y (1.15) se pueden escribir en forma matricial

$$\begin{bmatrix} x_{2l+1} \\ y_{2l+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -\frac{M}{\mu}\omega^2 & \frac{\lambda}{\mu} - \frac{M}{\mu}\omega^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{2l} \\ y_{2l} \end{bmatrix}$$

Si definimos

$$X_{2l+1} = \begin{bmatrix} x_{2l+1} \\ y_{2l+1} \end{bmatrix}, \quad I + T_2 = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -\frac{M}{\mu}\omega^2 & \frac{\lambda}{\mu} - \frac{M}{\mu}\omega^2 \end{bmatrix}, \quad X_{2l} = \begin{bmatrix} x_{2l} \\ y_{2l} \end{bmatrix}$$

entonces podemos escribir

$$X_{2l+1} = (I + T_2)X_{2l}, \dots \dots \dots (1.17)$$

De las ecuaciones (1.16) y (1.17) se tiene

$$(I + T_2)X_{2l} = (I + T_2)(I + T_1)X_{2l-1} = X_{2l+1}$$

en consecuencia la matriz de transferencia que relaciona los vectores estado de dos átomos alrededor de la posición impar es

$$(I + T_2)(I + T_4) \equiv I + T'$$

con

$$\left[\begin{array}{cc} 1 - \frac{m}{\lambda} \omega^2 & 1 + \frac{\mu}{\lambda} - \frac{m}{\lambda} \omega^2 \\ -\frac{1}{\mu} (m + M) \omega^2 + \frac{mM}{\lambda\omega} \omega^4 & 1 - \frac{1}{\mu} (m + M) \omega^2 - \frac{M}{\lambda} \omega^2 + \frac{mM}{\lambda\mu} \omega^4 \end{array} \right] \equiv I + T'$$

.....(1.18)

Ahora se usa esta matriz en lugar de la matriz $I + T$ de la red monoatómica.

Poniendo

$$4\text{sen}^2\beta = (M + m) \frac{\lambda + \mu}{\lambda\mu} \omega^2 - \frac{Mm}{\lambda\mu} \omega^4, \quad \dots\dots(1.19)$$

en la matriz $I + T'$ y calculando el determinante de $I + T' - \lambda'I$ con λ' el valor característico, se obtiene la ecuación característica

$$\lambda'^2 + 2(2\text{sen}^2\beta - 1) = 0$$

Esta ecuación es semejante a la que se encontró para el caso de la red monoatómica lineal. Utilizando el hecho que

$$\det(I + T') = 1$$

se obtienen las mismas expresiones para los valores característicos de $I + T$ y la ecuación característica para ω . Las

frecuencias se obtienen resolviendo la ecuación (1.19) para $\beta = (n\pi)/N$. Al poner en esa ecuación ω explícitamente obtenemos

$$\omega^2 = \frac{(M + M)(\lambda + \mu) \pm \left\{ (M + M)^2 (\lambda + \mu)^2 - 16\lambda\mu M \text{sen}^2(n\pi/N) \right\}^{1/2}}{2mM}, \quad \dots \dots \dots (1.20)$$

con $n = 1, 2, \dots, N/2$ para N par

$n = 1, 2, \dots, (n-1)/2$ para N impar

En la ecuación anterior se muestra que ahora aparecen dos ramas de frecuencias características, que se denominan la rama acústica y la rama óptica.

En la siguiente parte de este capítulo vamos a calcular las frecuencias de las vibraciones localizadas, que se producen al incorporar imperfección local dentro de las redes anteriores, usando también el método de la matriz de transferencia. Para el caso de la cadena monoatómica se obtiene la solución del problema, cuando la impureza es una masa isotópica, pero en el caso de la cadena diatómica como el álgebra es muy laboriosa, solamente se analiza el problema en la aproximación en la que las masas de la cadena y las constantes de fuerza son aproximadamente iguales.

Consideraremos que el i -ésimo átomo en una red monoatómica regular es remplazado por un átomo impureza con masa M , este caso se ilustra en la siguiente figura.

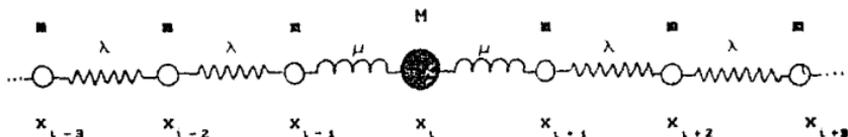


Figura 1.2 Cadena monoatómica infinita con imperfección M .

Las ecuaciones de movimiento de los átomos alrededor de la impureza son

$$-m\omega^2 x_{i-1} = -\lambda(x_{i-1} - x_{i-2}) - \mu(x_{i-1} - x_i), \dots \dots (1.21)$$

$$-M\omega^2 x_i = -\mu(x_i - x_{i-1}) - \mu(x_i - x_{i+1}), \dots \dots (1.22)$$

$$-m\omega^2 x_{i+1} = -\mu(x_{i+1} - x_i) - \lambda(x_{i+1} - x_{i+2}), \dots \dots (1.23)$$

Nuevamente escribiendo $x_i - x_{i-1} = y_{i-1}$ se pueden reescribir como antes estas ecuaciones en la forma de ecuaciones vectoriales.

Únicamente de las matrices de transferencia de la matriz I , T para la red regular, las anteriores que son las correspondientes a las ecuaciones (1.21), (1.22) y (1.23) resultan ser diferentes. Estas son, respectivamente

$$I + T_i \equiv \left[\begin{array}{cc} 1 & 1 \\ -\frac{m}{\mu} \omega^2 & \frac{\lambda}{\mu} - \frac{m}{\mu} \omega^2 \end{array} \right], \dots \dots (1.24)$$

$$I + T_2 \equiv \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -\frac{M}{\mu} \omega^2 & 1 - \frac{M}{\mu} \omega^2 \end{bmatrix}, \dots\dots\dots(1.25)$$

$$I + T_3 \equiv \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -\frac{M}{\lambda} \omega^2 & \frac{\mu}{\lambda} - \frac{M}{\lambda} \omega^2 \end{bmatrix}, \dots\dots\dots(1.26)$$

En lo que sigue a estas matrices se les llamará matrices impureza.

Escribiendo

$$P \equiv (I + T_3)(I + T_2)(I + T_1), \dots\dots\dots(1.27)$$

se obtiene para H:

$$H = (I + T)^{n-1} P (I + T)^{1-2}$$

Dado que el $\det(P) = 1$ y consecuentemente el $\det(H) = 1$, la ecuación de valores característicos bajo la condición de frontera cíclica está dada nuevamente por traza $H = 2$. La traza de H puede ser calculada como sigue:

$$\begin{aligned} \text{traza } H &= \text{traza} \left\{ U(I + \Lambda)U^{-1}U(I + \Lambda)U^{-1}U \dots \right. \\ &\quad \left. \dots U^{-1}U(I + \Lambda)U^{-1}PU(I + \Lambda)U^{-1} \cdot \dots \cdot U(I + \Lambda)U^{-1} \right\} \\ &= \text{traza} \left\{ (I + \Lambda)^{N-3}U^{-1}PU \right\}, \dots \dots \dots (1.28) \end{aligned}$$

haciendo $\frac{M}{m} = f = 1 + \epsilon$, $\frac{\lambda}{\mu} = g = 1 + \delta$ y $\omega^2 = \frac{4\lambda}{m} \text{sen}^2 \beta$

se encuentra para los elementos de P:

$$\begin{aligned} P_{11} &= 1 - 12 \text{sen}^2 \beta + 16 \text{sen}^4 \beta - (4 \text{sen}^2 \beta - 16 \text{sen}^4 \beta)\epsilon - \\ &\quad - (12 \text{sen}^2 \beta - 32 \text{sen}^4 \beta)\delta - (4 \text{sen}^2 \beta - 32 \text{sen}^4 \beta)\epsilon\delta + \\ &\quad + (16 \text{sen}^4 \beta)\delta^2(1 + \epsilon), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} P_{22} &= 1 - 24 \text{sen}^2 \beta + 80 \text{sen}^4 \beta - 64 \text{sen}^6 \beta - (8 \text{sen}^2 \beta - \\ &\quad - 48 \text{sen}^4 \beta + 64 \text{sen}^6 \beta)\epsilon - (12 \text{sen}^2 \beta - 96 \text{sen}^4 \beta + \\ &\quad + 128 \text{sen}^6 \beta)\delta - (4 \text{sen}^2 \beta - 64 \text{sen}^4 \beta + 128 \text{sen}^6 \beta)\epsilon\delta + \\ &\quad + (16 \text{sen}^4 \beta - 64 \text{sen}^6 \beta)\delta^2 + (16 \text{sen}^4 \beta - 64 \text{sen}^6 \beta)\epsilon\delta^2, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} P_{21} &= -12 \text{sen}^2 \beta + 64 \text{sen}^4 \beta - 64 \text{sen}^6 \beta - (4 \text{sen}^2 \beta - 32 \text{sen}^4 \beta + \\ &\quad + 64 \text{sen}^6 \beta)\epsilon + (64 \text{sen}^4 \beta - 128 \text{sen}^6 \beta)\delta + (32 \text{sen}^4 \beta - \\ &\quad - 128 \text{sen}^6 \beta)\epsilon\delta - (64 \text{sen}^6 \beta)\delta^2 - (64 \text{sen}^6 \beta)\epsilon\delta^2, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 P_{12} = & 3 - 16 \operatorname{sen}^2 \beta + 16 \operatorname{sen}^4 \beta - (8 \operatorname{sen}^2 \beta - 16 \operatorname{sen}^4 \beta) \epsilon + \\
 & + (2 - 20 \operatorname{sen}^2 \beta + 32 \operatorname{sen}^4 \beta) \delta - (12 \operatorname{sen}^2 \beta - \\
 & - 32 \operatorname{sen}^4 \beta) \epsilon \delta - (4 \operatorname{sen}^2 \beta - 16 \operatorname{sen}^4 \beta) \delta^2 - (4 \operatorname{sen}^2 \beta - \\
 & - 16 \operatorname{sen}^4 \beta) \epsilon \delta^2.
 \end{aligned}$$

con P_{11} , P_{22} , P_{21} y P_{12} junto con (1.5) y (1.6) se obtiene, para los elementos de

$$Q \equiv U^{-1} P U$$

$$\begin{aligned}
 Q_{11} = \bar{Q}_{22} = & \exp(6i\beta) \{1 + i\epsilon \tan \beta + 2i\delta\epsilon \tan \beta\} - \\
 & - \exp(4i\beta) \{2i\delta\epsilon \tan \beta + \\
 & + 4i\delta^2(1 + \epsilon) \operatorname{sen}^2 \beta \tan \beta\}, \dots\dots\dots(1.29)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 Q_{12} = \bar{Q}_{22} = & \exp(-2i\beta) \{i(\epsilon - 2\delta) \tan \beta + 4i(\delta + \epsilon\delta + \\
 & + \delta^2 + \epsilon\delta^2) \tan \beta \operatorname{sen}^2 \beta\}. \dots\dots\dots(1.30)
 \end{aligned}$$

En consecuencia, de (1.28) tenemos

$$\begin{aligned}
 \text{traza } H = & (1 + \lambda_1)^{N-3} Q_{11} + (1 + \lambda_2)^{N-3} Q_{22} \\
 = & \exp[2i(N-3)\beta] Q_{11} + \exp[-2i(N-3)\beta] Q_{22} \\
 = & \cos[2(N-3)\beta] (Q_{11} + Q_{22}) + i \operatorname{sen}[2(N-3)\beta] \cdot \\
 & \cdot (Q_{11} - Q_{22})
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= 2\cos(2N\beta) - 2\{\epsilon + 2\delta + 2\delta\epsilon\}\tan\beta \operatorname{sen}(2N\beta) + \\
 &+ 4\delta\epsilon \tan\beta \operatorname{sen}[2(N-1)\beta] + \\
 &+ 8\delta^2(1+\epsilon)\operatorname{sen}^2\beta \tan\beta \operatorname{sen}[2(N-1)\beta], \dots (1.31)
 \end{aligned}$$

Para la red regular, $f = g = 1$ y entonces la ec.(1.31) se reduce a $2\cos(2N\beta)$, justo lo que se obtuvo antes.

Por simplicidad se considera el caso $\delta = 0$, es decir, el caso en el cual las constantes de fuerza son iguales $\lambda = \mu$. En este caso la ecuación de valores característicos (1.31) se transforma en

$$f(\beta) \equiv \cos(2N\beta) - \epsilon \tan\beta \operatorname{sen}(2N\beta) = 1, \dots (1.32)$$

Las frecuencias características se obtienen de los puntos de intersección de la curva que representa la función $f(\beta)$ y la línea que representa la constante 1. La siguiente figura 1.3 muestra esto para el caso $N = 8$ y $\epsilon = \pm 1/2$. Como se observa, las frecuencias características están doblemente degeneradas, un conjunto de componentes decrece o se incrementa de acuerdo con $\epsilon > 0$ ó $\epsilon < 0$ y el otro conjunto permanece sin cambio.

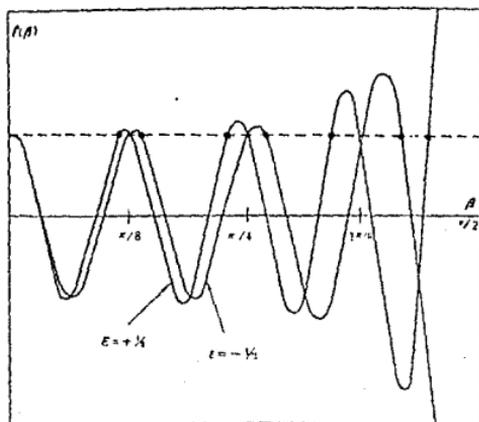


Fig. 1.3

Por otra parte en el caso de $\epsilon > 0$, es decir, cuando la impureza es más ligera que el átomo regular, las frecuencias características máximas están fuera de la banda de frecuencias. Para construir la figura 1.3 se tomó a N par. También se puede verificar que la situación no cambia cuando N es impar. Debido a que esta frecuencia está fuera de la banda ella corresponde al nivel impureza, por lo tanto se le llama "frecuencia impureza".

Un método para evaluar la frecuencia impureza, es escribir

$$\beta = \frac{\pi}{2} + i\gamma$$

Sustituyendo β en la ecuación (1.32) se tiene

$$\cos[2N(\frac{\pi}{2} + i\gamma)] - \epsilon \tan(\frac{\pi}{2} + i\gamma)\text{sen}[2N(\frac{\pi}{2} + i\gamma)] = 1$$

y utilizando identidades trigonométricas esta ecuación se puede escribir como

$$\cos(i2N\gamma) + \epsilon \tan(i\gamma)\text{sen}(i2N\gamma) = \pm 1$$

en donde el signo más corresponde a N par y el menos a N impar.

La ecuación anterior se puede escribir en términos de funciones trigonométricas hiperbólicas como

$$\cosh(2N\gamma) + \epsilon \tanh(\gamma)\text{senh}(2N\gamma) = \pm 1, \dots\dots\dots(1.33)$$

o bien

$$h(\gamma) \equiv \coth(2N\gamma) + \epsilon \tanh(\gamma) = \pm \operatorname{cosech}(2N\gamma), \dots\dots\dots(1.34)$$

Si se grafican las tres funciones hiperbólicas que aparecen en esta ecuación, se puede ver que si $\epsilon \neq 0$ la ecuación (1.34) no tiene raíz y si $\epsilon = 0$ tiene una independientemente si N es par o impar. Esto está de acuerdo con el resultado anterior.

Finalmente se considera una red diatómica, pero ahora se agrega un átomo impureza. En la red diatómica considerada se reemplaza un átomo regular en la posición impar por un átomo impureza con masa $M' = M(1 + \epsilon)$. Entonces como se vió se tiene que reemplazar la matriz de transferencia $I + T'$ en H por la matriz:

$$I + T'' = I + T' + \epsilon \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -\frac{M\omega^2}{\mu} + \frac{mM\omega^4}{\lambda\mu} & -\frac{M\omega^2}{\mu} - \frac{M\omega^2}{\lambda} + \frac{mM\omega^4}{\lambda\mu} \end{pmatrix}$$

$$\equiv I + T' + \Delta T' \dots\dots\dots(1.35)$$

La traza de H está dada ahora por

$$\text{traza } H = \text{traza}[(I + \Lambda')^N + (I + \Lambda')^{N-1}U'^{-1}\Delta T'U'], \dots\dots\dots(1.36)$$

donde U' es la matriz que diagonaliza T' y Δ' es la matriz ya diagonalizada.

Por simplicidad se considera el caso en el cual M y m no

difieren apreciablemente una de la otra, lo mismo para las constantes de fuerza μ y λ , esto es, haciendo $M = (1 + \xi)\mu$ y $\mu = (1 + \eta)\lambda$. Se han despreciado los términos de potencias mayores que uno para ξ y η . Con β dada por (1.19), se obtiene

$$m\omega^2 \cong \frac{2\lambda(2 + \xi + \eta)}{1 + \xi} \operatorname{sen}^2(\beta/2), \dots\dots\dots(1.37)$$

entonces

$$\begin{aligned} (U'^{-1}\Delta T'U')_{11} &= \overline{(U'^{-1}\Delta T'U')_{22}} \\ &\cong -(\epsilon/2i)(2 + \xi \operatorname{sec}\beta)\cot(\beta/2)\exp(2i\beta), \\ &\dots\dots\dots(1.38) \end{aligned}$$

para la rama acústica, y

$$m\omega^2 \cong \frac{2\lambda(2 + \xi + \eta)}{1 + \xi} \operatorname{cos}^2(\beta/2), \dots\dots\dots(1.39)$$

por lo tanto

$$\begin{aligned} (U'^{-1}\Delta T'U')_{11} &= \overline{(U'^{-1}\Delta T'U')_{22}} \\ &\cong -(\epsilon/2i)(-2 + \xi \operatorname{sec}\beta)\cot(\beta/2)\exp(2i\beta), \\ &\dots\dots\dots(1.40) \end{aligned}$$

para la rama óptica. De este modo la ecuación de frecuencias para los modos localizados en esta red diatómica se

convierte en

$$\cos(2N\beta) - \varepsilon[1 + (\xi/2)\sec\beta]\tan(\beta/2)\operatorname{sen}(2N\beta) = 1, \dots\dots\dots(1.41)$$

y

$$\cos(2N\beta) + \varepsilon[1 - (\xi/2)\sec\beta]\cot(\beta/2)\operatorname{sen}(2N\beta) = 1, \dots\dots\dots(1.42)$$

para las ramas acústica y óptica respectivamente. El intervalo de la variable β es $(0, \pi/2)$ para ambas ecuaciones. Sin embargo, al reemplazar la variable β en la ecuación (1.42) por $\pi - \beta$ se obtiene como función de β la misma fórmula dada por la ecuación (1.41), por lo que es posible usar la ecuación (1.41) en el intervalo extendido $(0, \pi)$ como la ecuación de valores característicos para ambas ramas. ω es entonces determinada, de acuerdo a las ecuaciones (1.37) y (1.39) por:

$$\omega^2 = (\lambda + \mu)(1/M + 1/M)\operatorname{sen}^2(\beta/2), \dots\dots\dots(1.43)$$

Se usa N en lugar de $2N$ y β en lugar de 2β , para comparar el resultado de arriba con el caso monoatómico. Entonces las ecuaciones (1.41) y (1.42) se transforman en

$$\cos(2N\beta) - \varepsilon[1 + (\xi/2)\sec(2\beta)]\tan\beta \operatorname{sen}(2N\beta) = 1, \dots\dots\dots(1.44)$$

y

$$\omega^2 = (\lambda + \mu)(1/M + 1/M)\operatorname{sen}^2\beta, \dots\dots\dots(1.45)$$

respectivamente. Esta es la fórmula que corresponde a (1.32) obtenida previamente.

De la ecuación (1.44) se observa que, debido al término que

contiene $\sec(2\beta)$, éste hace posible que las frecuencias de la impureza se dividan de la parte alta de la rama inferior o de la parte baja de la parte superior. Estas situaciones son tabuladas abajo. En todos los casos las dos frecuencias degeneradas se dividen debido a la impureza, y una de ellas decrece o crece algunas veces siendo empujada fuera de la banda. La dirección de su cambio es indicada por + ó - de acuerdo si se incrementa o decrece. $\pi/4$ corresponde o no corresponde a los valores característicos no perturbados de acuerdo con $N/2$ si es par o impar. Los dos casos son tabulados separadamente. Los símbolos \uparrow y \downarrow significan respectivamente que la última y la primera frecuencia característica en la banda, son empujados fuera de ella. Una de las dos frecuencias en $\pi/4$ se consideró como perteneciente a la banda inferior y la otra a la banda superior. Se observa que la frecuencia característica correspondiente a $\pi/2$ se convierte en frecuencia impureza cuando $\epsilon \ll 0$, justo como se esperaba de el resultado obtenido en el caso monoatómico. Los resultados anteriores se muestran en la siguiente tabla.

Branch →		acoustical branch		optical branch	
Case ↓		$0 \leq \beta < \pi/4$	$\beta = \pi/4$	$\beta = \pi/4$	$\pi/4 < \beta \leq \pi/2$
$\epsilon > 0$	$\epsilon > 0$	$N/2$ odd	-		+ -
		$N/2$ even	-	-	+ -
	$\epsilon < 0$	$N/2$ odd	- + \uparrow		\downarrow -
		$N/2$ even	- +	\uparrow	\downarrow -
$\epsilon < 0$	$\epsilon > 0$	$N/2$ odd	+ \uparrow		\downarrow - + \uparrow
		$N/2$ even	+ -	\uparrow	\downarrow - + \uparrow
	$\epsilon < 0$	$N/2$ odd	+ -		+ \uparrow
		$N/2$ even	+ -	-	+ \uparrow

CAPITULO II

El propósito de este capítulo es calcular las frecuencias y las formas de los modos vibracionales localizados, en la cadena diatómica de Hori y Asahi cuando se incorpora en ella una impureza. Para realizar lo anterior usaremos el método de diferencia finita⁽⁹⁾. Como el caso de la cadena monoatómica con la impureza discutido en el capítulo anterior, queda como un caso particular de nuestro estudio, no lo vamos a considerar en forma explícita. Se hace notar que el problema resuelto por Hori y Asahi presentado en la sección anterior, sólo fue discutido en la aproximación en la que las masas m y M son muy cercanas, y cuando las constantes de interacción son prácticamente iguales. Sin embargo, nosotros presentamos aquí la solución analítica cerrada al problema anterior.

La teoría matemática de diferencia finita ha sido explicada completamente antes^(9,12,13) y no la vamos a repetir aquí. Como la solución de el problema que nos ocupa hace uso de los conjuntos de soluciones de la pareja de ecuaciones de diferencia finita acopladas que definen al problema, ecuaciones (1.13) y (1.14), en la primera parte de este capítulo vamos a presentar una discusión cualitativa de los conjuntos de soluciones generales de las ecuaciones (1.13) y (1.14), y de los rangos de frecuencia en donde estos conjuntos de soluciones son válidos. Paralelamente esto nos permitirá presentar la gráfica de las distintas regiones de frecuencia de los modos normales de vibración en este sistema. En la segunda parte vamos a plantear el cálculo de las frecuencias y las formas de los modos

localizados en la cadena de Hori y Asahi cuando ésta tiene la impureza, como un problema de valor característico. En la parte final de este capítulo reduciremos nuestro problema a dos casos ampliamente documentados en la literatura. Uno de ellos es el estudio de los modos localizados en una cadena lineal monoatómica con interacciones a primeros vecinos, la cual tiene una masa imperfección. El otro es el de una cadena lineal diatómica con interacciones a primeros vecinos, y una masa isotópica como imperfección. Mostraremos algunos resultados importantes en estos casos con el propósito de que nuestro análisis de la red de Hori y Asahi con la imperfección local que estudiaremos en el siguiente capítulo lo podamos comparar.

Iniciamos considerando la cadena diatómica infinita del capítulo anterior, pero ahora usamos otra notación que ilustramos en la siguiente figura.

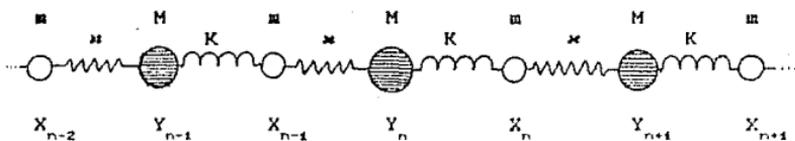


Fig.2.1 Cadena diatómica infinita.

En la figura anterior m y M representan otra vez las masas de los átomos alternados regularmente, con interacción a primeros vecinos y con un parámetro de red unitario. Las X_n , Y_n representan

a los máximos desplazamientos relativos a las posiciones de equilibrio para los átomos de masas m y M respectivamente. A las constantes de interacción ahora las llamaremos K y κ .

Como antes mencionamos la dinámica del cristal perfecto está determinada por la pareja de ecuaciones (1.13) y (1.14) que aquí reescribiremos con la notación de la figura 2.1.

$$-m\omega^2 X_n = K(Y_n - X_n) + \kappa(Y_{n+1} - X_n), \dots\dots\dots(2.1)$$

$$-M\omega^2 Y_{n+1} = \kappa(X_n - Y_{n+1}) + K(X_{n+1} - Y_{n+1}), \dots\dots\dots(2.2)$$

Siguiendo exactamente los mismos pasos que en un trabajo anterior⁽¹⁰⁾, es posible desacoplar las ecuaciones (2.1) y (2.2) y encontrar una ecuación de diferencia finita de segundo orden para alguna de las variables. La integración de esta variable que se hace usando métodos operacionales, nos da la solución de esa variable en forma analítica, y las ecuaciones utilizadas en el desacoplamiento nos permite expresar la solución de la otra variable en términos de la ya obtenida. Como ya mencionamos este método permite obtener los diferentes conjuntos de soluciones analíticas para las diferentes regiones de frecuencia. Los resultados obtenidos se muestran en la figura (2.2), en donde se observan las diferentes regiones de frecuencia para el cristal perfecto.

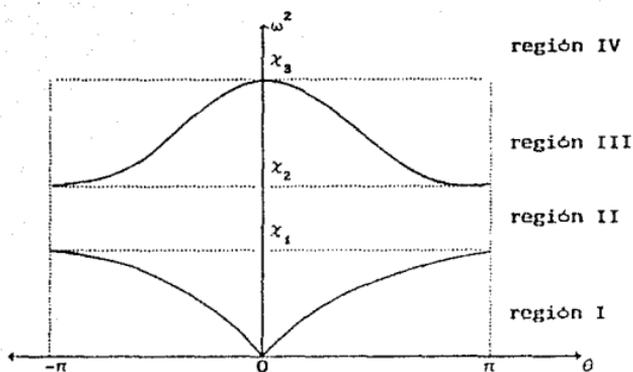


Figura 2.2. Espectro de frecuencias para la cadena sin impureza en la primera zona de Brillouin.

En la ilustración anterior χ_1 , χ_2 , χ_3 son las orillas de las bandas de frecuencia acústica y óptica. Las cuales están dadas por

$$\chi_1 = \frac{(\epsilon + 1)(\rho + 1) - \sqrt{(\epsilon + 1)^2(\rho + 1)^2 - 16\rho\epsilon}}{2\epsilon}, \dots (2.3)$$

$$\chi_2 = \frac{(\epsilon + 1)(\rho + 1) + \sqrt{(\epsilon + 1)^2(\rho + 1)^2 - 16\rho\epsilon}}{2\epsilon}, \dots (2.4)$$

$$\chi_3 = \frac{(\epsilon + 1)(\rho + 1)}{\epsilon}, \dots (2.5)$$

En las ecuaciones (2.3), (2.4) y (2.5) hemos definido

$$\chi = \frac{m\omega^2}{K}, \quad \epsilon = \frac{M}{m} \quad \text{y} \quad \rho = \frac{x}{K}.$$

El espectro de frecuencias lo hemos dividido en cuatro regiones. La región I que va de 0 a χ_1 corresponde a la rama acústica, la región II: de χ_1 a χ_2 corresponde a la brecha de frecuencias prohibidas de la cadena perfecta. La región III: de χ_2 a χ_3 se asocia con la rama óptica y por último la región IV que corresponde a valores mayores que χ_3 es otra región prohibida para las vibraciones de la cadena limpia.

Un conjunto de soluciones para la región I, nos dá la rama acústica y en la región III las ondas de tipo óptico, que no vamos a estudiar aquí para resolver nuestro problema. Otro conjunto de soluciones son las orillas de las ramas, pero éstos tampoco los vamos a estudiar aquí.

Cuando hacemos el parámetro $\rho = 1$, es decir las constantes de interacción iguales, entonces las ecuaciones (2.3), (2.4) y (2.5) que nos representan los límites de las ramas acústica y óptica, se transforman en:

$$\omega_1^2 = \frac{2K}{M}$$

$$\omega_2^2 = \frac{2K}{m}$$

$$\omega_z^2 = \frac{2K(m + M)}{mM}$$

Las frecuencias anteriores ω_1 y ω_2 representan los límites de las ramas máxima acústica y mínima óptica respectivamente, en la red diatómica de Born, esta red fué muy discutida en la literatura⁽¹⁴⁾.

La ω_B es la máxima frecuencia de la rama óptica.

Para las regiones II y IV el conjunto de soluciones son del tipo sucesión. Este tipo de solución es la que nos interesa a nosotros para resolver el problema de los modos localizados, como ha sido propuesto antes⁽⁹⁾.

En esta segunda parte vamos a resolver el problema que se plantearon Hori-Asahi; que es el de obtener las frecuencias y las formas asociadas a los modos vibracionales localizados en una red lineal diatómica con interacciones a primeros vecinos, la cual contiene una masa impureza isotópica en su interior.

Como ya mencionamos⁽⁹⁾ el conjunto de soluciones tipo sucesión para los máximos desplazamientos de los modos de vibración, cuyas frecuencias se encuentran en las regiones prohibidas (regiones II y IV de la figura 2.2) del cristal perfecto, y describen a los modos localizados, son necesarios para plantear el problema de valor característico. Estas soluciones tienen la siguiente forma

$$Y_n = C_1 E_1^n + C_2 E_2^n, \dots \dots \dots (2.6)$$

$$X_n = \left[\frac{\rho E_{1,2} + 1}{1 + \rho - \chi} \right] Y_n, \dots \dots \dots (2.7)$$

en donde

$$E_{1,2} = \frac{-\Omega_1 \pm \sqrt{\Omega_1^2 - 4}}{2}, \dots \dots \dots (2.8)$$

con
$$\Omega_1 = \frac{\epsilon \chi^2 - (\rho + 1)(\epsilon + 1)\chi + 2\rho}{\rho}, \dots\dots\dots(2.9)$$

Además como ya habíamos definido $\chi = \frac{m\omega^2}{K}$, $\epsilon = \frac{M}{m}$ y $\rho = \frac{\kappa}{K}$.

C_1 y C_2 son constantes arbitrarias. El modelo de imperfección local lo ilustramos en la siguiente figura.

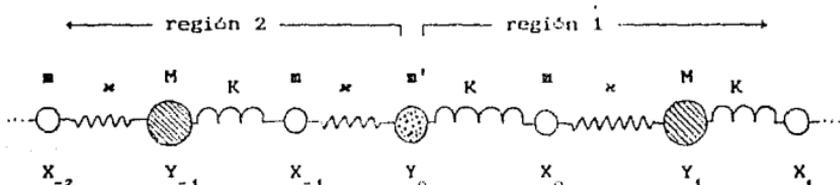


Figura 2.3 Modelo de cadena diatómica infinita con una masa impureza isotópica.

Como el problema es uno de valor característico, nos conviene proponer una solución por regiones dividiendo la red en dos partes: Sea la región 1 la que se encuentra a la derecha del átomo impureza en la posición Y_0 , y la región 2 la sección de la red que se encuentra hacia la izquierda del átomo impureza.

Usando las ecuaciones (2.6) y (2.7) proponemos como solución para el problema de valor propio la siguiente:

Para la región 1

$$Y_n^{(1)} = C_1 E_1^n + C_2 E_2^n, \quad n \geq 0$$

$$X_n^{(1)} = \left[\frac{\rho E_{1,2} + 1}{1 + \rho - \chi} \right] Y_n^{(1)}, \quad n \geq 0 \quad \dots\dots(2.10)$$

Para la región 2

$$Y_n^{(2)} = C_3 E_1^n + C_4 E_2^n, \quad n \leq 0$$

$$X_n^{(2)} = \left[\frac{\rho E_{1,2} + 1}{1 + \rho - \chi} \right] Y_n^{(2)}, \quad n \leq -1 \quad \dots\dots(2.11)$$

Sin embargo, como se buscan modos localizados, es necesario introducir en estas soluciones las condiciones de que se amortigüen hacia los extremos de la red. Esta condición llamada de localización se puede escribir como

$$\lim_{n \rightarrow \pm\infty} X_n = 0, \quad \lim_{n \rightarrow \pm\infty} Y_n = 0$$

Al aplicar esta condición en las regiones 1 y 2 a las ecuaciones (2.10) y (2.11), se determinan dos de las constantes arbitrarias que aparecen en la solución general para cada región. Una vez realizado esto las soluciones en cada región tienen la siguiente forma

Para la región 1

$$Y_n^{(1)} = C_1 E_1^n, \quad n \geq 0 \quad \dots\dots\dots(2.12)$$

$$X_n^{(1)} = \left[\frac{\rho E_1 + 1}{1 + \rho - \chi} \right] C_1 E_1^n, \quad n \geq 0, \quad \dots\dots\dots(2.13)$$

Para la región 2

$$Y_n^{(2)} = C_2 E_1^{-n}, \quad \text{con } n \leq 0, \quad \dots\dots\dots(2.14)$$

$$X_n^{(2)} = \left[\frac{\rho + E_1}{1 + \rho - \chi} \right] C_2 E_1^{-(n+1)}, \quad \text{con } n \leq -1, \quad \dots\dots\dots(2.15)$$

Ahora bien, para acoplar las soluciones en las dos regiones mencionadas, utilizamos la ecuación de movimiento del átomo de imperfección m' la cual es

$$-m' \omega^2 Y_0 = K(X_0 - Y_0) + m'(X_{-1} - Y_0)$$

utilizando los parámetros ρ , ϵ , χ ya definidos, y además

$$c_1 = \frac{m'}{m}$$

esta ecuación se transforma en

$$\rho X_{-1} + (\chi c_1 - \rho - 1) Y_0 + X_0 = 0 \quad \dots\dots\dots(2.16)$$

Sustituyendo la solución propuesta, ecuaciones (2.12), (2.13), (2.14) y (2.15) en la ecuación de movimiento del átomo de

imperfección se obtiene

$$\rho \left[\frac{\rho + E_1}{1 + \rho - \chi} \right] C_2 + (\chi c_1 - \rho - 1) C_1 + \left[\frac{\rho E_1 + 1}{1 + \rho - \chi} \right] C_1 = 0, \dots\dots\dots(2.17)$$

Pero debido a la continuidad de las soluciones en las regiones 1 y 2, es decir,

$$Y_0^{(1)} = Y_0^{(2)}$$

se obtiene que $C_1 = C_2$, Entonces la ecuación anterior se escribe ahora como

$$\rho \left[\frac{\rho + E_1}{1 + \rho - \chi} \right] + \chi c_1 - \rho - 1 + \frac{\rho E_1 + 1}{1 + \rho - \chi} = 0,$$

de donde se tiene que

$$E_1 = \frac{c_1 \chi^2 - (\rho + 1)(c_1 + 1)\chi + 2\rho}{2\rho} \dots\dots\dots(2.18)$$

por otro lado de la ecuación (2.8), podemos definir para E_1

$$E_1^2 - E_1 \Omega_1 + 1 = 0, \dots\dots\dots(2.19)$$

Utilizando la ecuación (2.19) y (2.18), obtenemos la ecuación de valores propios que se puede escribir en términos de los parámetros de la red: ρ , ϵ , y c_1 de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
 & (\epsilon_1^2 - 2\epsilon\epsilon_1)x^3 + 2(\rho + 1)[(\epsilon_1 + 1)(\epsilon - \epsilon_1) + \epsilon_1(\epsilon + 1)]x^2 + \\
 & + \left[(\rho + 1)^2(\epsilon_1 + 1)(\epsilon_1 - 2\epsilon - 1) - 4\rho\epsilon \right]x + 4\rho(\rho + 1)(\epsilon + 1) = 0.
 \end{aligned}
 \tag{2.20}$$

La ecuación (2.20) proporciona la frecuencia de los modos localizados en la red de Hori y Asahi. Hemos mostrado en esta sección que el problema planteado por los autores anteriores, se puede resolver en una forma analítica usando la técnica de las ecuaciones de diferencia finita. Para finalizar este capítulo vamos a analizar en forma resumida, primero la red monoatómica lineal con interacciones a primeros vecinos y con una masa impureza y después la cadena diatómica con interacciones a primeros vecinos y una masa isotópica contenida en ella.

Red monoatómica lineal con interacciones a primeros vecinos y una impureza. Este tipo de red se ilustra en la siguiente figura

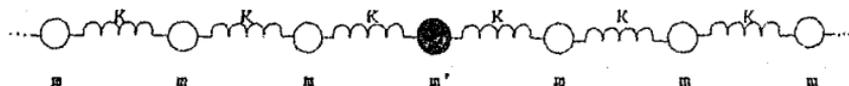


Figura 2.4 Cadena monoatómica con una imperfección.

Para analizar este caso tomamos $\rho = 1$ en el polinomio encontrado antes, ecuación (2.20) y obtenemos

$$\begin{aligned}
 & (\epsilon_1^2 - 2c\epsilon_1)\chi^3 + (-4\epsilon_1^2 + 8c\epsilon_1 + 4c)\chi^2 + \\
 & + (4\epsilon_1^2 - 8c\epsilon_1 - 12c - 4)\chi + 8(c + 1) = 0 \\
 & \dots\dots\dots(2.21).
 \end{aligned}$$

La ecuación (2.21) tiene a 2 como raíz, lo cual la reduce a una ecuación de segundo grado

$$\epsilon_1(\epsilon_1 - 2c)\chi^2 + 2[\epsilon_1(2c - \epsilon_1) + 2c]\chi - 4(c + 1) = 0, \dots\dots(2.22).$$

Haciendo $c = 1$ y utilizando el hecho de que nuevamente $\chi = 2$ es raíz la ecuación (2.22) se reduce a una de primer grado que está dada por

$$\chi = \frac{4}{\epsilon_1(2 - \epsilon_1)} \dots\dots\dots(2.23).$$

Esta ecuación nos proporciona las frecuencias de los modos localizados de la red monoatómica con interacciones a primeros vecinos. Este resultado ha sido calculado por una gran variedad de técnicas matemáticas por muchos autores. La bibliografía más extensa para este problema puede consultarse en un trabajo reciente⁽¹⁵⁾.

En la siguiente figura mostramos la gráfica de la ecuación (2.23).

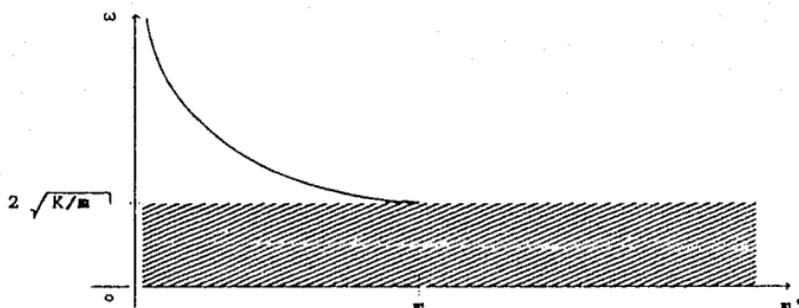


Figura 2.5 Curva de frecuencias de los modos localizados en función de la masa impureza m' .

La figura 2.5 nos muestra que existe un modo vibracional localizado, únicamente cuando la masa del átomo impureza m' es menor que la masa de los átomos de la red. Además se observa que conforme la masa impureza tiende a cero, las frecuencias de el modo tienden a infinito, y que en el caso contrario cuando la masa impureza es igual a la masa de los átomos de la red, el modo desaparece exactamente en el límite de la banda de frecuencias acústica para el cristal perfecto, es decir cuando $\epsilon_1 = 1$, que corresponde a $m = m'$.

A continuación calculamos las formas de los modos para algunos valores de m' . Sustituyendo $\rho = 1$ y $\epsilon = 1$ en las ecuaciones (2.12) y (2.13), se obtienen los máximos desplazamientos de los átomos para este tipo de red, los cuales mostramos, para algunos valores de la masa impureza m' en la siguiente figura (2.6).

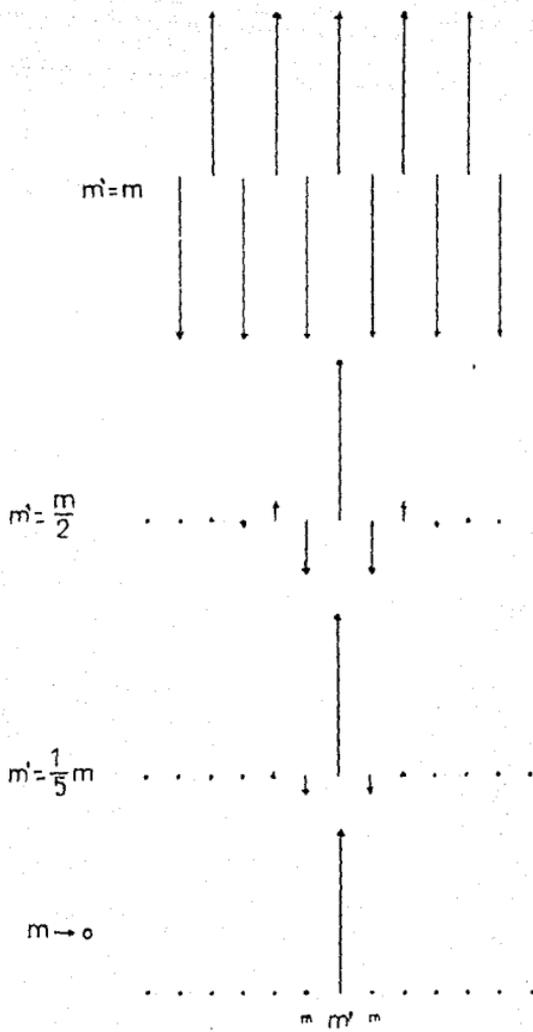


Figura 2.6 Formas de los modos de vibración localizadas correspondientes a la gráfica 2.5.

De la figura anterior, se observa que cuando la masa del átomo imperfección es igual a la masa de los átomos de la red, cada átomo oscila con una frecuencia igual a el valor límite superior para la rama de frecuencias acústica del cristal perfecto, teniendo todos los átomos la misma amplitud de desplazamiento, como era de esperarse ya que en esta situación no existe átomo impureza dentro del cristal. Cuando $m' < m$ se observa el efecto de localización, teniendo la masa impureza la mayor amplitud en el desplazamiento; cuando m' tiende a cero, todos los átomos de la red están estáticos, siendo únicamente la masa impureza la que tiene movimiento. Además, en todos los casos, cada átomo oscila en sentido opuesto al de su vecino más cercano, teniendo a la masa impureza como punto de simetría. Estos resultados también ya han sido presentados en la literatura⁽¹⁵⁾.

Red diatómica lineal con una masa impureza isotópica con interacciones a primeros vecinos.

La red se ilustra en la siguiente figura:



Figura 2.7 Cadena diatómica con una imperfección m' .

En este caso sustituimos $\rho = 1$ en la ecuación (2.20) y utilizando el hecho de que $\chi = 2$ es solución, se obtiene el polinomio que resulta ser de segundo grado en χ a saber:

$$e_1(e_1 - 2c)\chi^2 + 2[e_1(2c - e_1) + 2c]\chi - 4(c + 1) = 0, \dots\dots\dots(2.24)$$

Esta es la ecuación de las frecuencias asociadas a los modos vibracionales localizados en la red diatómica con una impureza isotópica, y que ya ha sido reportada en la literatura⁽⁹⁾. Debido a que las frecuencias de vibración de los átomos de la red están en función de sus masas, estudiaremos dos casos: Cuando $c \gg 1$ y $c \ll 1$ que corresponden respectivamente a $M \gg m$ y $M \ll m$. Además cada uno se subdivide en tres casos, de acuerdo al valor de la masa impureza.

Caso 1.- $M \gg m$ ($c \gg 1$)

Caso 2.- $M \ll m$ ($c \ll 1$)

a) $M \gg m \gg m'$

a) $m \gg M \gg m'$

b) $M \gg m' \gg m$

b) $m \gg m' \gg M$

c) $m' \gg M \gg m$

c) $m' \gg m \gg M$

discutiremos cada uno de ellos.

Caso 1.- $M \gg m$ ($c \gg 1$)

En este caso se ha sustituido la impureza en el lugar de un átomo pesado y la figura 2.8 nos muestra la gráfica de los resultados obtenidos a partir de la ecuación de frecuencias (2.24).

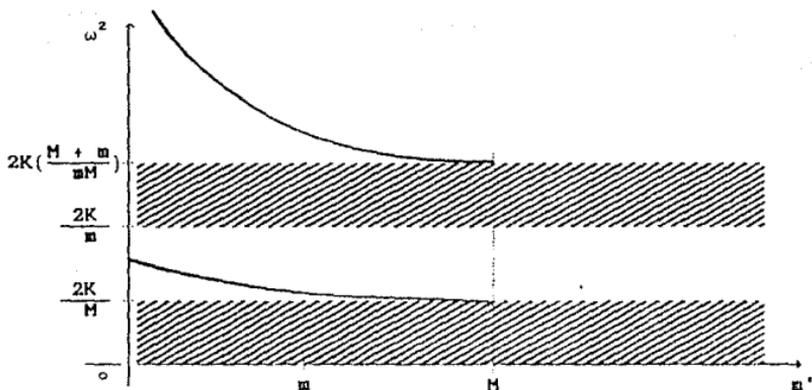


Figura 2.8 Curvas de frecuencias en función de la masa impureza m' para el caso $M > m$

La gráfica anterior nos muestra la existencia de dos modos localizados, uno de tipo brecha y otro local, siempre y cuando se cumplan los subcasos a) y b), es decir, la masa impureza debe ser menor que el valor de la masa mayor de los átomos. Cuando la impureza es mayor que los átomos de la red (subcaso c), estos modos de vibración desaparecen. Además se observa que cuando el valor de la masa impureza tiende a cero, el modo brecha tiende al promedio de esta rama, mientras que en el modo de tipo local la frecuencia del modo tiende a infinito.

A continuación se muestran las formas de algunos de los modos de tipo local para $M = 2m$.

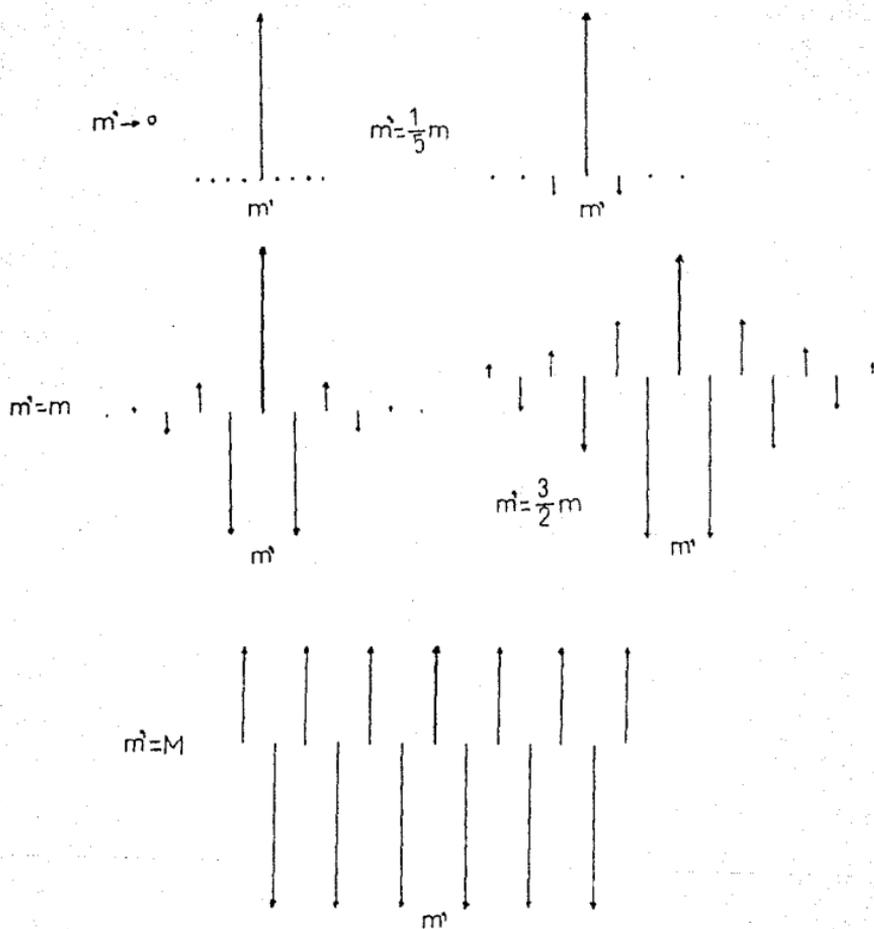


Figura 2.9 Formas de los modos de tipo local correspondientes a la figura 2.8.

La gráfica anterior nos muestra el comportamiento de los átomos de la cadena, en el modo tipo local. En cada una de las formas anteriores se observa que cada átomo vibra en sentido opuesto al de su primer vecino, teniendo la impureza el mayor desplazamiento, cuando $M \gg m \gg m'$. Por el contrario cuando $M \gg m' \gg m$, los átomos vecinos a la impureza tienen un mayor desplazamiento que ésta. Además, cuando $m' = M$, todos los átomos con masa menor m , oscilan con una amplitud mayor que la de los átomos pesados, y a una frecuencia de oscilación correspondiente a la rama superior óptica del cristal perfecto.

Las formas de algunos modos de tipo brecha para $M = 2m$ se muestran en la figura 2.10

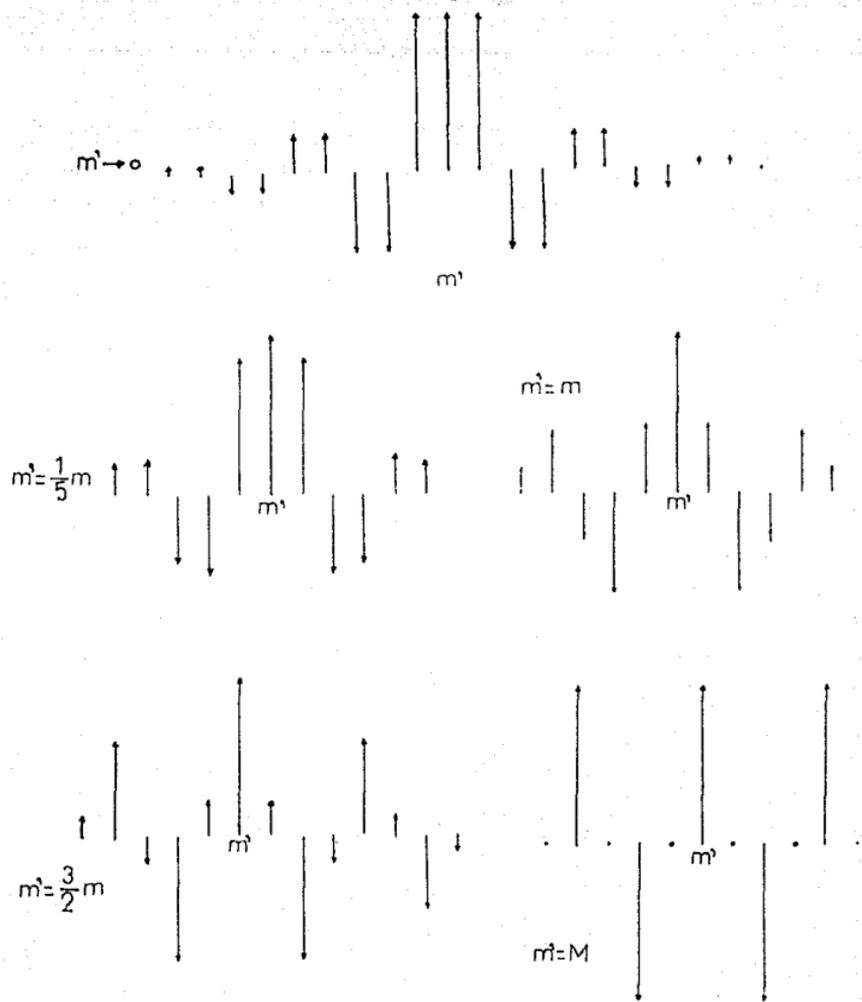


Figura 2.10 Formas de los modos localizados de tipo brecha correspondientes a la figura 2.8.

En el conjunto de gráficas de la figura 2.10 se observa que en todos los casos, la impureza vibra en el mismo sentido que el de sus vecinos más cercanos, y los átomos vecinos vibran por parejas en sentido opuesto al de sus parejas más próximas. Además cuando m' tiende a cero tiene la misma amplitud de oscilación que la de sus primeros vecinos. Cuando $m' = M$ se obtiene un modo de vibración correspondiente al límite superior de la rama acústica del cristal perfecto, oscilando con la misma amplitud y sentido opuesto, únicamente los átomos de masa mayor.

Caso 2.- $M < m$ ($\epsilon < 1$).

Aquí se ha sustituido el átomo impureza en el lugar de un átomo ligero. La figura 2.22 representa los resultados obtenidos a partir de la ecuación de frecuencias para este caso.

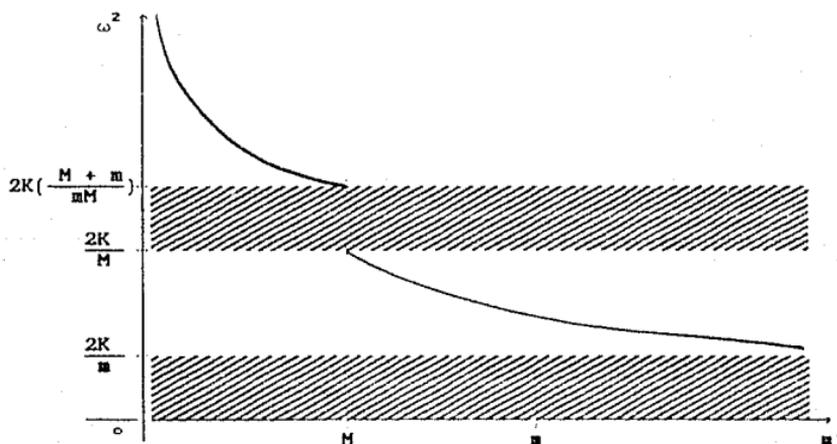


Figura 2.11 Curvas de frecuencias de los modos localizados para el caso $M < m$.

La gráfica anterior nos muestra que existe un modo de tipo local, solo cuando la impureza es menor que los átomos de la red, y este modo desaparece cuando esta es igual a la masa de los átomos ligeros. Además cuando la masa impureza es mayor que la masa de los átomos más pequeños (subcaso b), aparece un modo de vibración de tipo brecha en el límite inferior de la rama óptica del cristal perfecto, y cuando m' tiende a infinito (subcaso c) este modo tiende al límite superior de la rama acústica.

A continuación graficamos las formas de algunos de los modos vibracionales de tipo local que aparecen cuando $m > M > m'$, para $M = \frac{1}{2} m$.

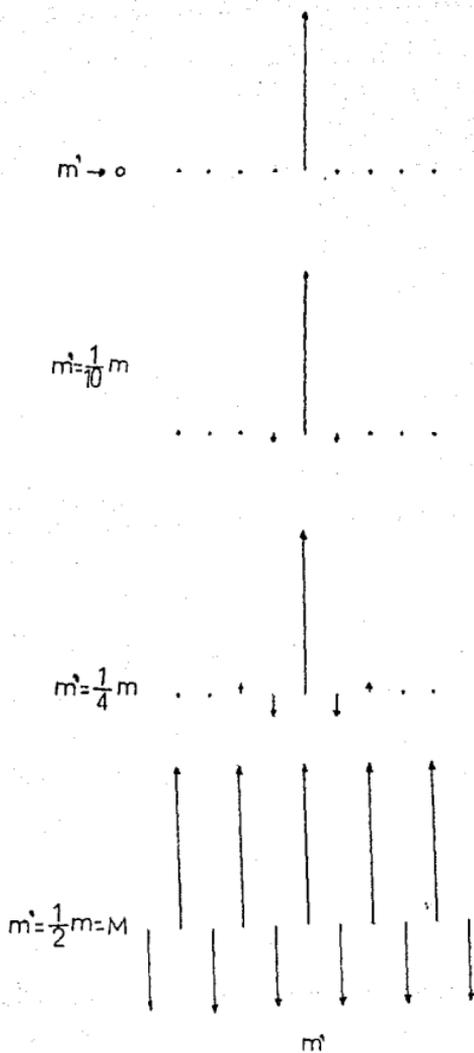


Figura 2.12 Formas de los modos vibratoriales de tipo local para $m > M > m'$ y $M = (1/2)m$.

El conjunto de gráficas anteriores nos indican que el comportamiento de los átomos de la cadena en el modo local es similar al caso 1 que ya se discutió.

Las formas de algunos modos vibracionales de tipo brecha se ilustran en la siguiente figura 2.13 para el caso $M = (1/2)\pi$.

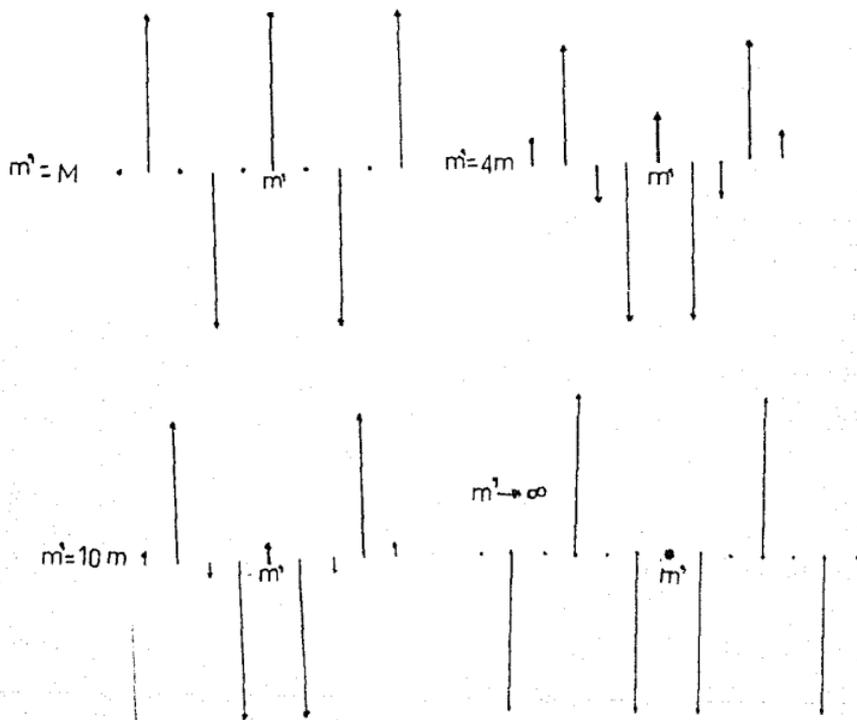


Figura 2.13 Formas de los modos localizados de tipo brecha correspondientes a la figura 2.11

De las gráficas de la figura 2.13 se observa que si la masa impureza es igual a la masa de los átomos ligeros, estos son los únicos que oscilan en dirección opuesta, con una frecuencia igual al límite inferior de la rama óptica del cristal perfecto. Cuando la masa impureza es mayor que los átomos de la red, la amplitud de su oscilación disminuye y aumenta la amplitud de los átomos vecinos, los cuales vibran en dirección opuesta. En el límite cuando m' tiende a infinito, los únicos átomos que oscilan son los de masa mayor, estando la impureza en su posición de equilibrio junto con los átomos ligeros.

Los resultados anteriores de las formas de los modos localizados ya han sido estudiados en la literatura⁽⁹⁾ por diferentes autores, utilizando diversas técnicas matemáticas. Aquí presentamos este trabajo para remarcar el hecho de que el problema que nos interesa, lo contiene como caso particular y para poder establecer las diferencias respecto a cada caso.

CAPITULO III

En este capítulo vamos a presentar el análisis del problema que se plantearon Hori y Asahi. Mostraremos gráficas para las frecuencias de los modos vibracionales localizados y también para las formas de las vibraciones. Pero antes vamos a estudiar un caso que no ha sido reportado previamente en la literatura especializada, el cual queda contenido en el modelo tratado aquí, y que es el caso de una cadena lineal monoatómica con dos constantes de fuerza y una masa imperfección en ella.

Impureza isotópica en una red monoatómica lineal con distintas constantes de interacción.

Este tipo de red se ilustra en la figura 3.1.



Figura 3.1 Cadena monoatómica con dos constantes.

Ahora substituyendo $\epsilon = 1$ en la ecuación (2.20) obtenemos

$$\begin{aligned}
 (\epsilon_1^2 - 2\epsilon_1)x^3 + 2(\rho + 1)\{(\epsilon_1 + 1)(1 - \epsilon_1) + 2\epsilon_1\}x^2 + \\
 + \{(\rho + 1)^2(\epsilon_1 + 1)(\epsilon_1 - 3) - 4\rho\}x + 8\rho(\rho + 1) = 0.
 \end{aligned}
 \tag{3.1}$$

Esta es la ecuación de las frecuencias de los modos

vibracionales localizados en esta red. Debido a que la ec.(3.1) depende de ρ y ϵ_1 estudiaremos dos casos: cuando $\rho > 1$ y cuando $\rho < 1$. En ambos casos la gráfica obtenida a partir de la ecuación (3.1) se muestra a continuación en la figura 3.2.

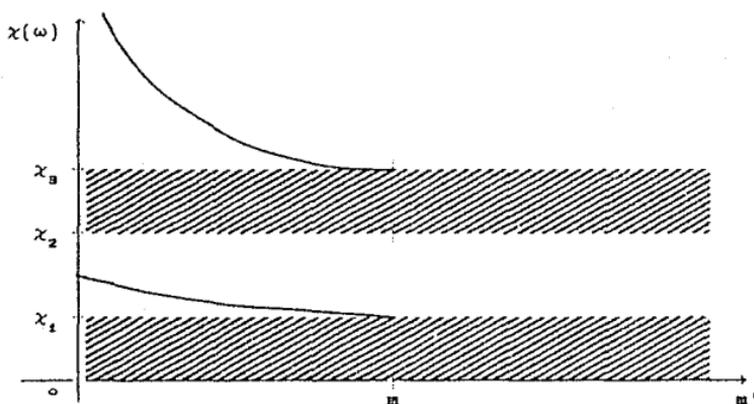


Figura 3.2 Curvas de frecuencias de los modos localizados en función de m' .

Aquí χ_1 , χ_2 , χ_3 son los límites de la ramas acústica y óptica del cristal perfecto y están dadas por:

$$\chi_1 = 2$$

$$\chi_2 = 2\rho$$

$$\chi_3 = 2(\rho + 1)$$

Se observa que en esta red monoatómica existen dos ramas de frecuencias del cristal perfecto, esto se debe a la presencia de las 2 constantes de interacción K y μ .

En este caso existen dos modos localizados uno de tipo brecha y otro local cuando la masa impureza es menor que la masa de los átomos de la red, desapareciendo estos modos cuando la impureza es igual a la masa de los átomos de la red. Si la masa impureza tiende a cero entonces la frecuencia del modo local tiende a infinito, y las del modo brecha tienen un valor definido χ_4 que depende del valor del parámetro ρ . Además cuando el tamaño de la masa impureza es mayor que la de los átomos de la red, aparece un modo vibracional de brecha que va desde el límite inferior de la rama óptica y cuando μ' tiende a infinito este modo de vibración tiende al valor promedio de los límites dados por χ_1 y χ_2 .

Las gráficas de las formas de los modos de vibración localizado de tipo local se muestran en la figura 3.3, cuando $\rho = 1/2$ y $\mu' \leq \mu$.

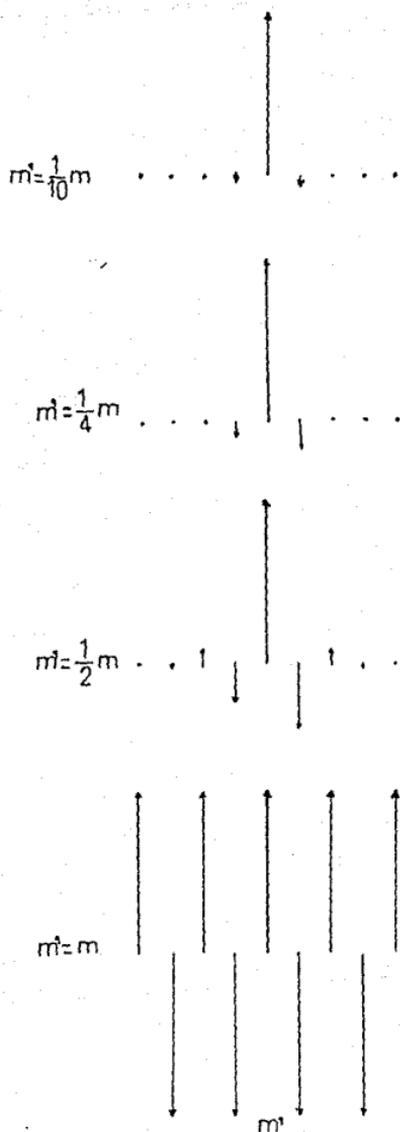


Figura 3.3 Formas de los modos de oscilación de tipo local para $\rho = 1/2$ y $m' \leq m$.

Del conjunto de las gráficas anteriores se observa que en todos los casos en los que $m' \leq m$, la impureza es la que tiene una mayor amplitud de oscilación, y cada átomo vibra en sentido opuesto al de su primer vecino, teniendo mayor amplitud de vibración el átomo sujeto a la impureza con la constante de interacción mayor.

En la figura 3.4 se muestran las formas de los modos de tipo brecha para $\rho = 1/2$ y $m' \leq m$.

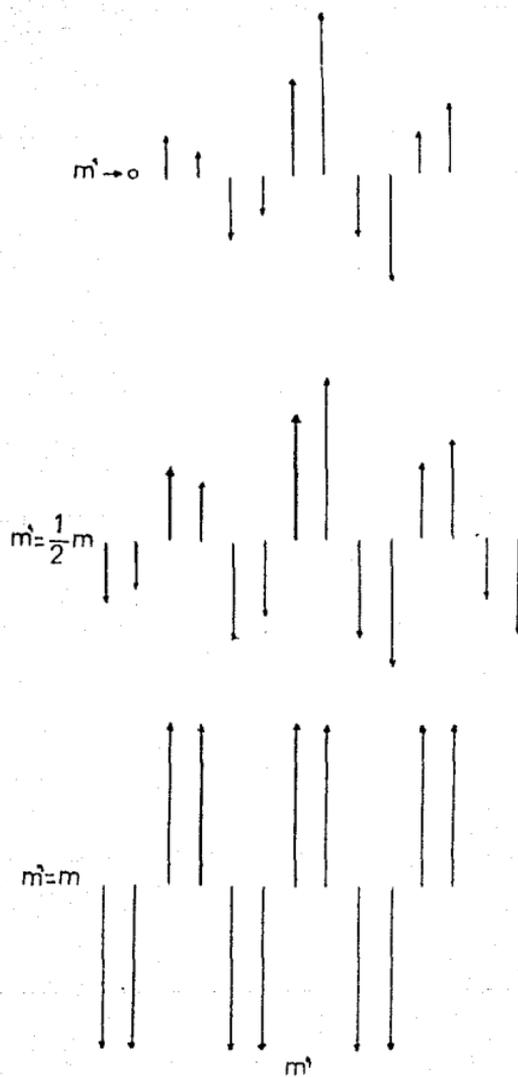


Figura 3.4 Formas de los modos localizados de tipo brecha para $\rho = 1/2$ y $m' \leq m$.

Como en los casos anteriores a los modos de tipo brecha, los átomos oscilan por parejas en sentido opuesto al de sus parejas más cercanas, teniendo ahora la impureza una amplitud de oscilación menor que el átomo vecino ligado con la constante de interacción mayor.

Las formas correspondientes a los modos localizados de tipo brecha para $\mu \geq \mu$ y $\rho = 1/2$, se grafican en la figura 3.5.

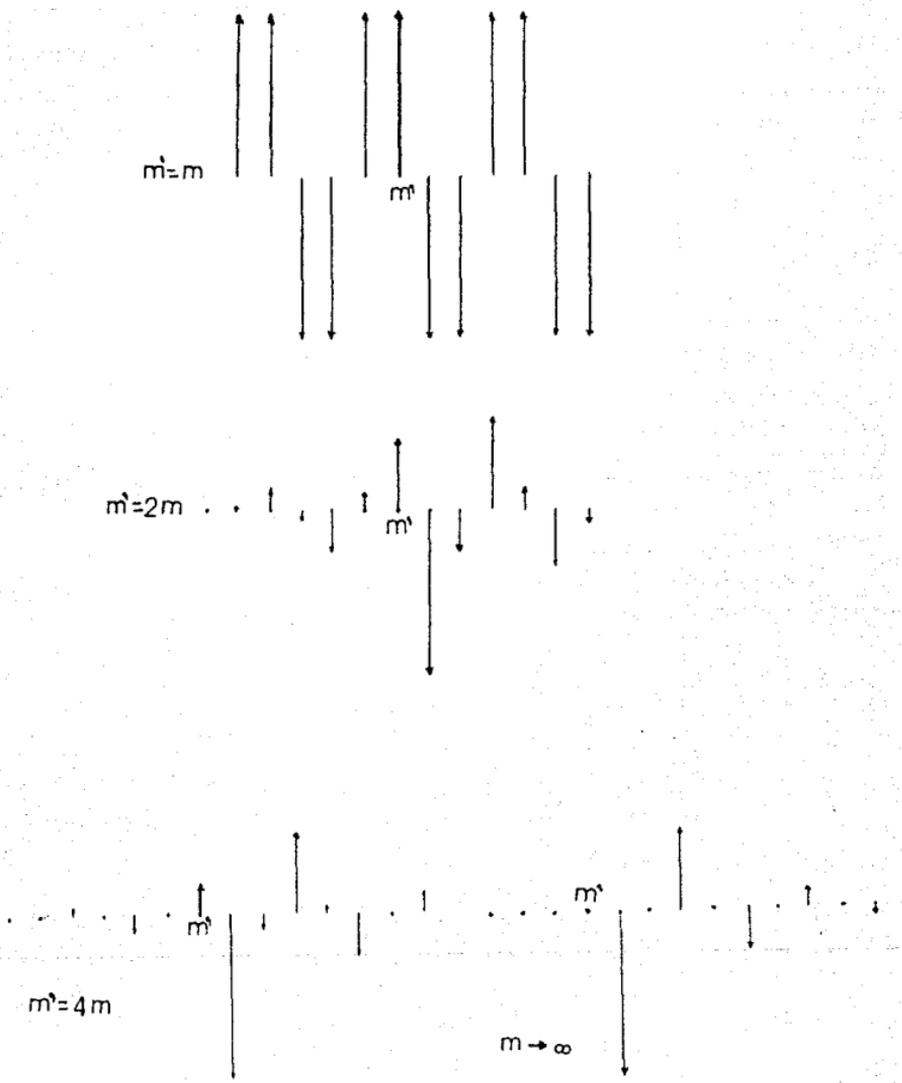


Figura 3.5 Formas de los modos de tipo brecha para $\rho = 1/2$ y $m' \geq m$.

De la figura anterior se observa que nuevamente los átomos oscilan por parejas, en sentidos opuestos a sus parejas más cercanas, teniendo una amplitud de oscilación mayor el átomo vecino ligado con la constante de interacción mayor. Además se observa en todos los casos que los átomos correspondientes a la región 2 tienen una amplitud de oscilación menor que los átomos de la región 1. De hecho cuando m' tiende a infinito, los únicos átomos que oscilan son los de la región 1 los cuales están ligados con la constante mayor K .

Para el caso $\rho > 1$, las curvas de frecuencias de los modos localizados son cualitativamente las mismas que las mostradas en la figura 3.5. Siendo en este caso mayores las frecuencias acústica y óptica del cristal perfecto, debido a que los límites χ_1 , χ_2 y χ_3 dependen de ρ .

Las formas de los modos vibracionales localizados para el caso $\rho > 1$, tienen prácticamente el mismo comportamiento, que en el caso anterior correspondiente a $\rho < 1$, pero ahora los átomos que presentan una mayor amplitud en el desplazamiento son los que están ligados con la constante de interacción $m > K$. De hecho todos los átomos de la región 1 tienen amplitudes de oscilación menores que los átomos de la región 2.

A continuación dibujamos algunas formas del comportamiento de los átomos de la red junto con la impureza para el caso $\rho = 1.25$.

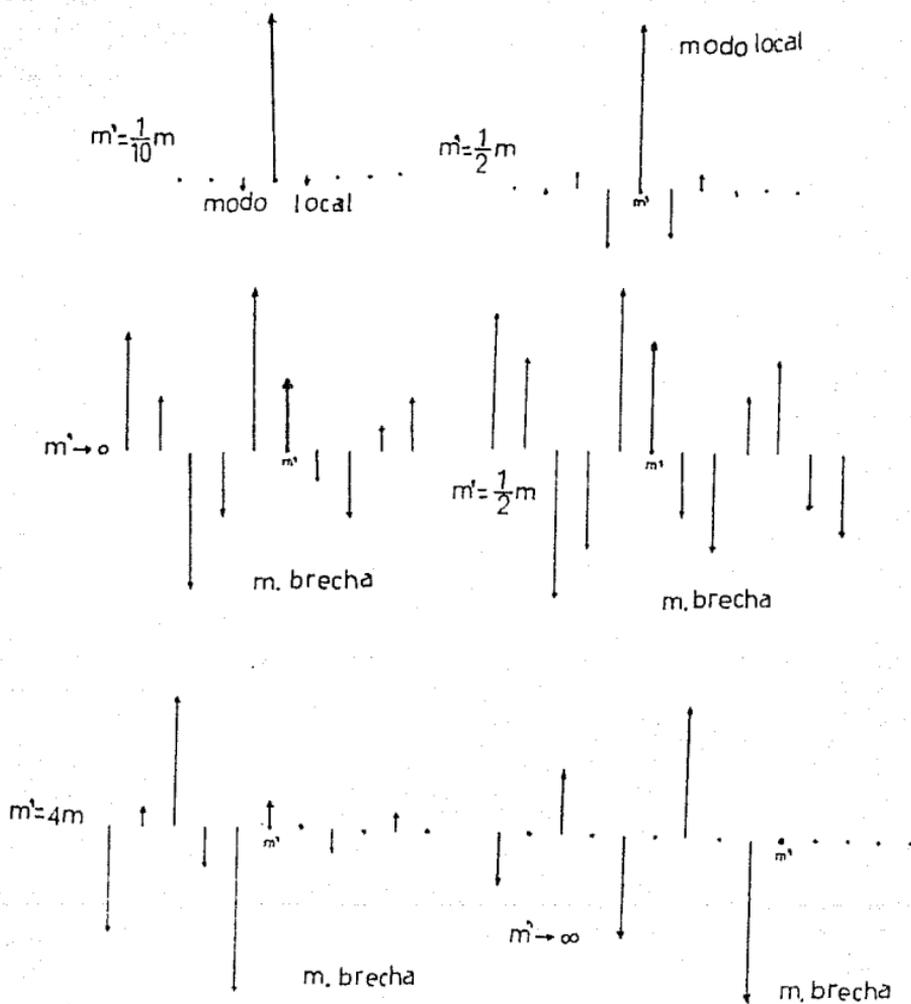


Figura 3.6 Formas de los modos para $\rho=1.25$

En la figura anterior hemos incluido los dos tipos de modos, a saber el local y el brecha. En ella podemos observar que las anotaciones que hicimos para el caso $\rho < 1$, son válidas también para este caso $\rho > 1$. Esto ya lo habíamos mencionado antes y es consecuencia de la simetría de estos casos $\rho > 1$ y $\rho < 1$.

Con esto damos por finalizado el análisis de los modos localizados en la red monoatómica lineal que tiene dos constantes de interacción distintas y una impureza isotópica en ella. El efecto de las dos constantes de interacción de la cadena, como pudimos observar en la figura 3.2, produce las dos ramas de frecuencias acústica y óptica en la red monoatómica. Este efecto es conocido en los cristales reales, como es el caso del silicio. Respecto a los modos localizados que aparecen en este sistema, tenemos un modo adicional en la brecha cuando la masa de la imperfección es más grande que la masa del átomo que sustituye en comparación con una red diatómica con una sola constante de interacción, y una masa impureza isotópica (vease fig. 2.8 del capítulo anterior). Si observamos la figura 2.11, ahí también aparece para la red diatómica un modo brecha localizado, si la masa imperfección es mayor que la masa del átomo que sustituye; cuando la sustitución se hace en la masa del átomo más pequeño, sin embargo el rango de la frecuencia del modo brecha es diferente. Por lo que se refiere a la sustitución por una masa menor que la que se está sustituyendo en la red diatómica, aparece otra vez en la figura 2.11 un modo local. También aquí en el caso que estamos estudiando de la red monoatómica con dos constantes de interacción diferentes aparece un modo local, si la

masa que sustituye es menor que la masa del cristal limpio, pero en este caso también se tiene un modo brecha. Por lo que se refiere a las formas de las vibraciones estas son parecidas a las del cristal diatómico, con una constante de interacción; aunque la diferencia que se puede observar en todas las gráficas anteriores, se debe a la asimetría que tenemos en el cristal monoatómico debido a las dos constantes de interacción diferentes.

Impureza isotópica en una red diatómica lineal con dos constantes de interacción.

En la segunda parte de este capítulo vamos a discutir en detalle el problema que se plantearon Hori y Asahi. Por lo tanto, vamos a analizar la ecuación (2.20) en el caso más general: cuando $\rho \neq 1$ y $\epsilon \neq 1$, que como ya se sabe corresponde a las frecuencias de vibración de una masa impureza isotópica, en una red diatómica lineal con dos constantes de interacción diferentes (figura 3.7). Calcularemos también las formas de los desplazamientos correspondientes a cada uno de los modos localizados que se encuentren y estableceremos las diferencias existentes con los casos particulares estudiados en el capítulo anterior.

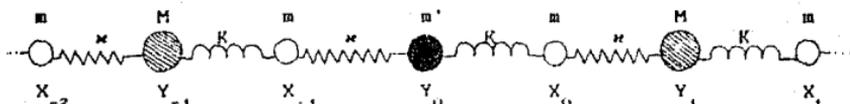


figura 3.7 Red de Hori y Asahi con una impureza m' .

Como la ec.(2.20) depende de los parámetros ρ , ϵ , y ϵ_1 .
Entonces debido a esta dependencia se tienen los siguientes casos:

- | | | |
|---------|----------------|---------------|
| Caso 1: | $\epsilon > 1$ | a) $\rho > 1$ |
| | | b) $\rho < 1$ |
| Caso 2: | $\epsilon < 1$ | a) $\rho > 1$ |
| | | b) $\rho < 1$ |

sin embargo, como ya se discutió en la sección anterior, los casos $\rho > 1$ y $\rho < 1$ son físicamente equivalentes, por lo que entonces estudiaremos uno de ellos: $\rho < 1$, es decir:

Caso 1: $\rho < 1$, $\epsilon > 1$

Caso 2: $\rho < 1$, $\epsilon < 1$

Caso 1.- $\rho < 1$, $\epsilon > 1$ (M>M)

En este caso se ha sustituido la impureza en el lugar de un átomo pesado, y la figura 3.8 nos muestra la gráfica de los resultados obtenidos a partir de la ecuación de frecuencias (2.20)

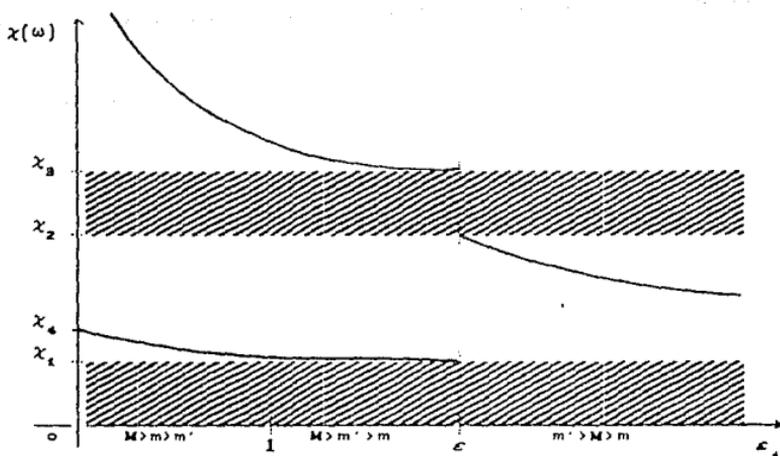


Figura 3.8 Curvas de frecuencia de los modos localizados para el caso $\epsilon > 1$.

En la gráfica anterior χ_1 , χ_2 , y χ_3 son respectivamente las frecuencias de los límites de las ramas acústica y óptica, las cuales están dadas por las ecuaciones (2.3), (2.4) y (2.5) del capítulo anterior. En esta gráfica se observa la existencia de dos modos localizados uno de tipo brecha y otro local siempre que la masa impureza no sea mayor que los átomos de la cadena, por el contrario, aparece un modo de tipo brecha en el límite inferior de la rama óptica cuando la masa impureza es mayor que los átomos de la red. Además cuando la masa impureza tiende a cero, las frecuencias del modo de tipo local tienden a infinito, mientras que el modo de tipo brecha tiende a un valor determinado de frecuencia, χ_4 entre los límites χ_1 y χ_2 . Sin embargo, cuando la masa impureza tiende a infinito, las frecuencias del modo brecha tienden al promedio de las

ramas.

Las formas de los modos de tipo local y brecha se muestran en las figuras 3.9 y 3.10 para el caso particular de $\epsilon = 2$, es decir, cuando $M = 2m$ y $\rho = 1/2$ que corresponde a $(K = 2m)$,

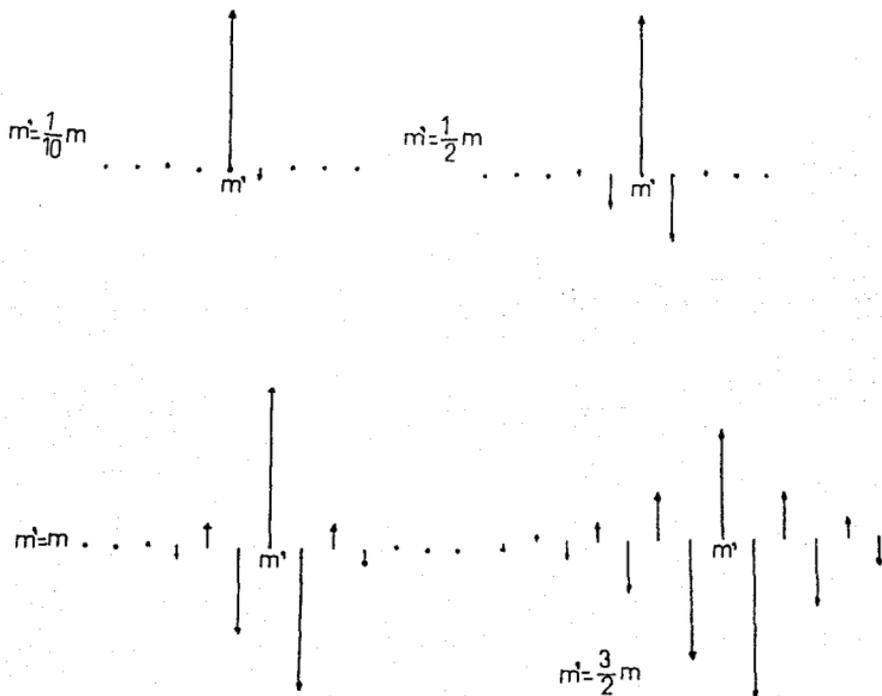


Figura 3.9 Formas de vibración de los modos de tipo local para $\epsilon = 2$ y $\rho = 1/2$.

Como podemos observar de la figura 3.9, el modo local que aparece aquí es del mismo estilo que el que discutimos en la sección anterior (ver figura 3.3), por lo que no se considera en forma detallada

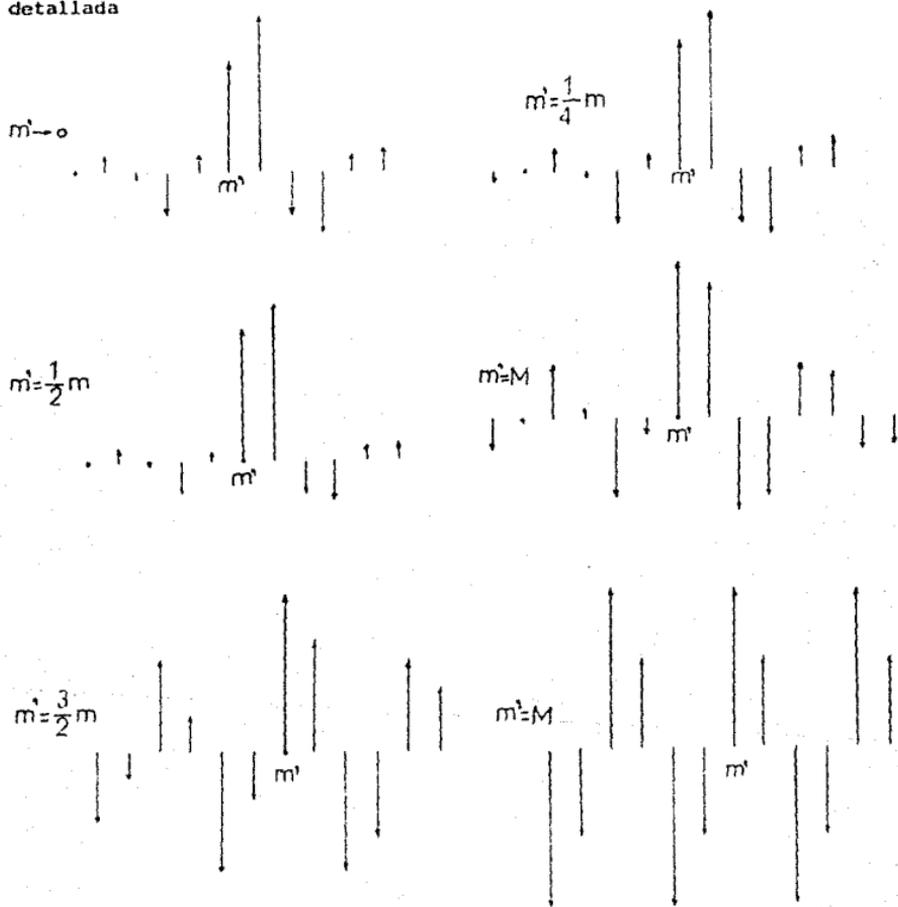


Figura 3.10 Formas de los modos localizados de tipo brecha cuando $M \gg m'$ o $M \gg m$.

Del conjunto de gráficas de la figura 3.10 se observa que si la masa impureza es menor que los átomos de la red, entonces oscila en el mismo sentido que sus primeros átomos vecinos, teniendo mayor amplitud de movimiento el átomo ligado con la constante mayor K . Para todo el conjunto de gráficas anteriores los átomos vibran por parejas en sentido opuesto al de sus parejas más cercanas. Cuando la impureza es igual a la masa del átomo ligero m , ésta oscila junto con su primer vecino, teniendo élla el mayor desplazamiento. Además cuando la impureza es igual al átomo de mayor masa, desaparece la localización en la cadena y todos los átomos oscilan con la frecuencia correspondiente a el límite superior de la rama acústica del cristal perfecto, teniendo mayor amplitud los átomos de mayor masa.

El siguiente conjunto de gráficas representadas en la figura 3.11, nos indican las formas de vibración de los átomos, correspondiente a el modo brecha, cuando el valor de la masa impureza es superior a las masas de los átomos de la red, para el caso particular $\rho = 1/2$, $\epsilon = 2$.

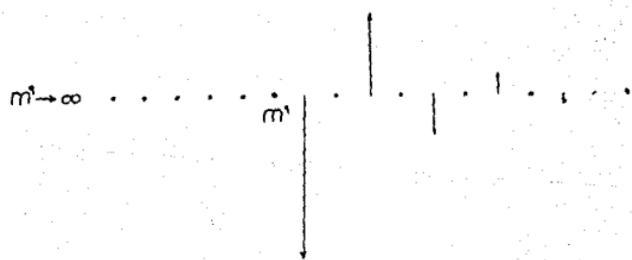
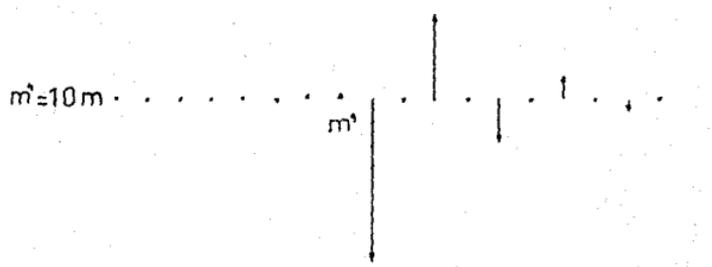
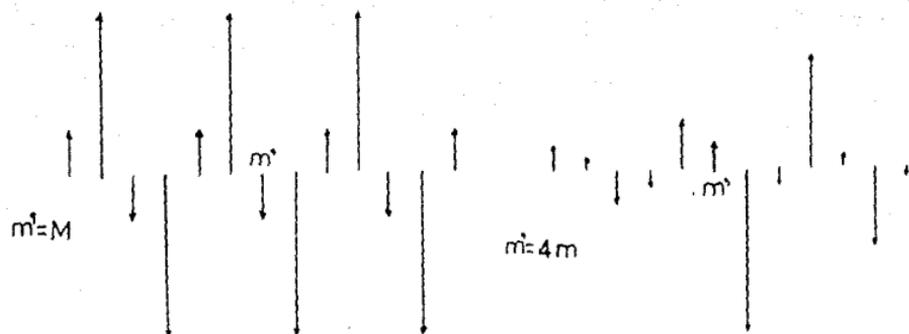


Figura 3.11 Formas de vibración de tipo brecha cuando $m^1 \gg M$, para $\rho = 1/2$, $\zeta = 2$.

Nuevamente, como en la figura anterior para el modo brecha, los átomos vibran en sentido opuesto al de sus parejas más cercanas. La impureza vibra en fase con el primer átomo vecino ligado a ella con el menor potencial. Además, cuando m' tiende a infinito oscilan únicamente los átomos ligeros de la región 1, que corresponden a los de mayor constante de interacción K .

Caso 2.- $\rho < 1, \epsilon < 1$ ($M < m$).

Ahora se sustituye el átomo imperfección en el lugar de un átomo ligero. Los resultados obtenidos a partir de la ecuación de frecuencias (2.20), se ilustran en la siguiente figura (3.12).

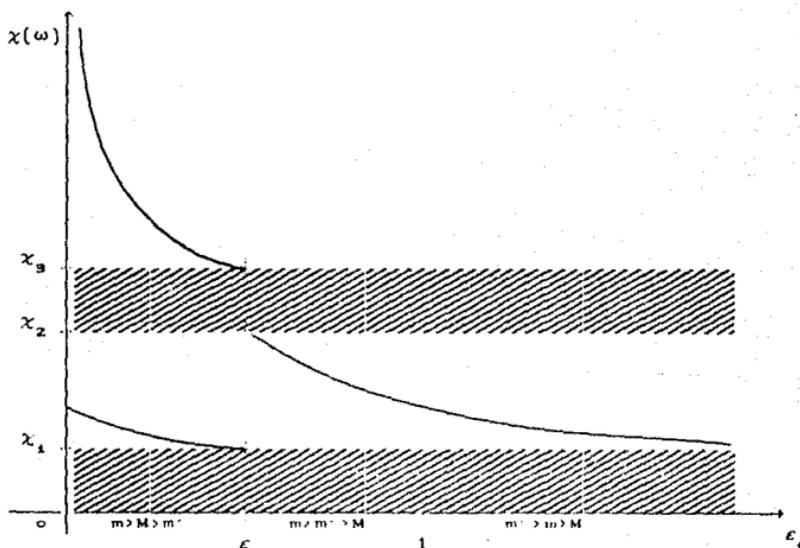


Figura 3.12 Curvas de frecuencias de los modos localizados para el caso $\rho < 1, \epsilon < 1$.

Nuevamente como en el caso 1, aparecen dos modos localizados uno de tipo brecha y otro local, cuando el valor de la masa impureza es menor que los átomos de la red, y cuando ésta tiende a cero, las frecuencias del modo local tienden a infinito y las del modo brecha, toman un valor definido entre los límites X_1 y X_2 . Además cuando el átomo impureza es mayor que los átomos ligeros, aparece un modo de tipo brecha, en el límite inferior de la rama óptica del cristal perfecto, y cuando m' tiende a infinito, las frecuencias de éste modo tienden al límite superior de la rama acústica.

Las formas de vibración para el modo de tipo local se ilustran en el conjunto de gráficas de la figura (3.13), para $\rho = 1/2$ y $c = 1/2$.

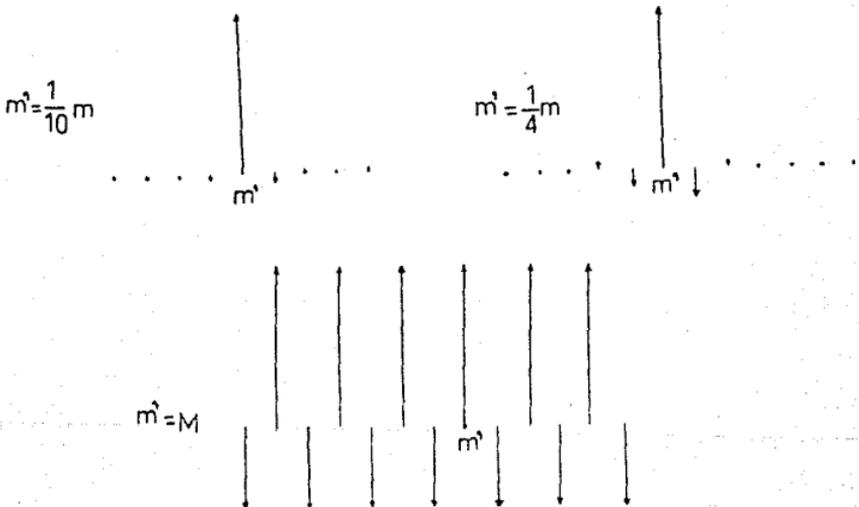


Figura 3.13 Formas de vibración correspondientes al modo de tipo local para $K = 2\pi$ y $m = 2M$

Nuevamente, como en los demás modos de vibración de tipo local, de la figura 3.13 se observa que los átomos oscilan en sentido opuesto a su vecino más cercano, teniendo en todos los casos la masa impureza la mayor amplitud de oscilación. Cuando el valor de la masa impureza tiende a cero, es la única que presenta movimiento dentro de la red. Además cuando su masa se iguala a la de los átomos ligeros, desaparece la localización vibrando todos los átomos de la red con la frecuencia correspondiente al límite superior de la rama óptica del cristal sin impureza, teniendo los átomos ligeros el doble de amplitud de oscilación que la de los átomos pesados.

Algunas de las formas del modo de tipo brecha aparecen en la siguiente figura 3.14 para el caso $\rho = 1/2$, $\epsilon = 1/2$, cuando $m \gg m'$.

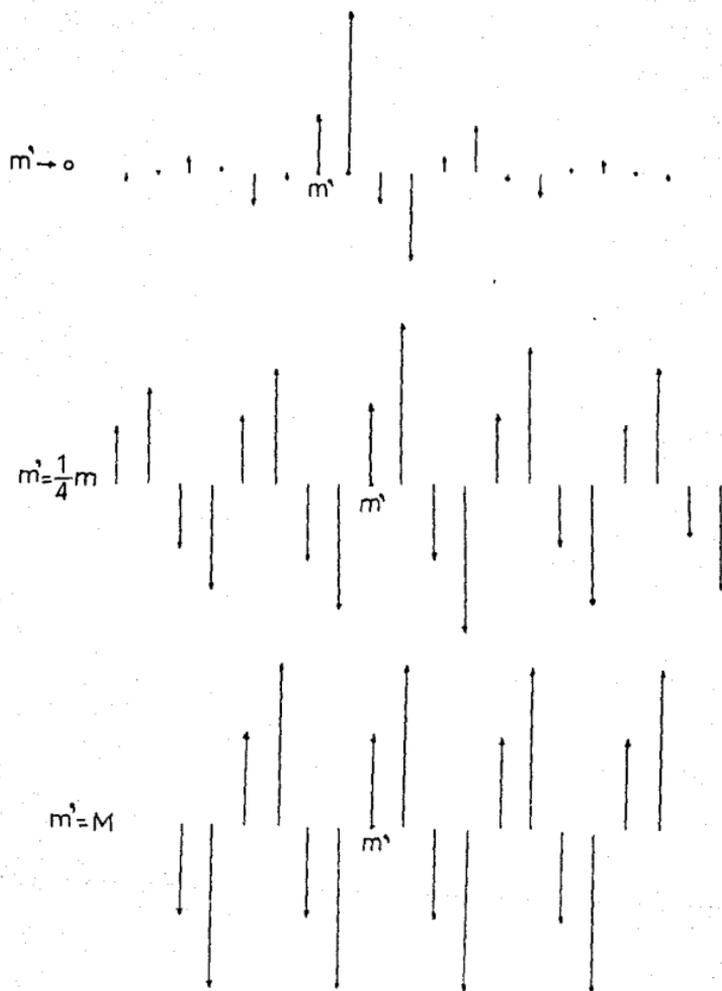


Figura 3.14 Formas del modo de vibración de tipo brecha para $\rho = 1/2$, $\epsilon = 1/2$, y $m > m'$.

Como se observa del conjunto de gráficas de la figura 3.14, los átomos oscilan en parejas (un átomo ligero junto con uno pesado), en sentido opuesto al de sus parejas más cercanas. En todas las gráficas de esta figura, el primer átomo vecino de la impureza ligado con el potencial mayor tiene una amplitud de oscilación superior. Además los átomos de la región 1 presentan una menor localización que los átomos de la región 2.

Por último dibujamos a continuación algunas formas de los modos de vibración de tipo brecha para el caso en el cual $m \gg m' \gg M$, $m' \gg M$ y $\rho = 1/2$.

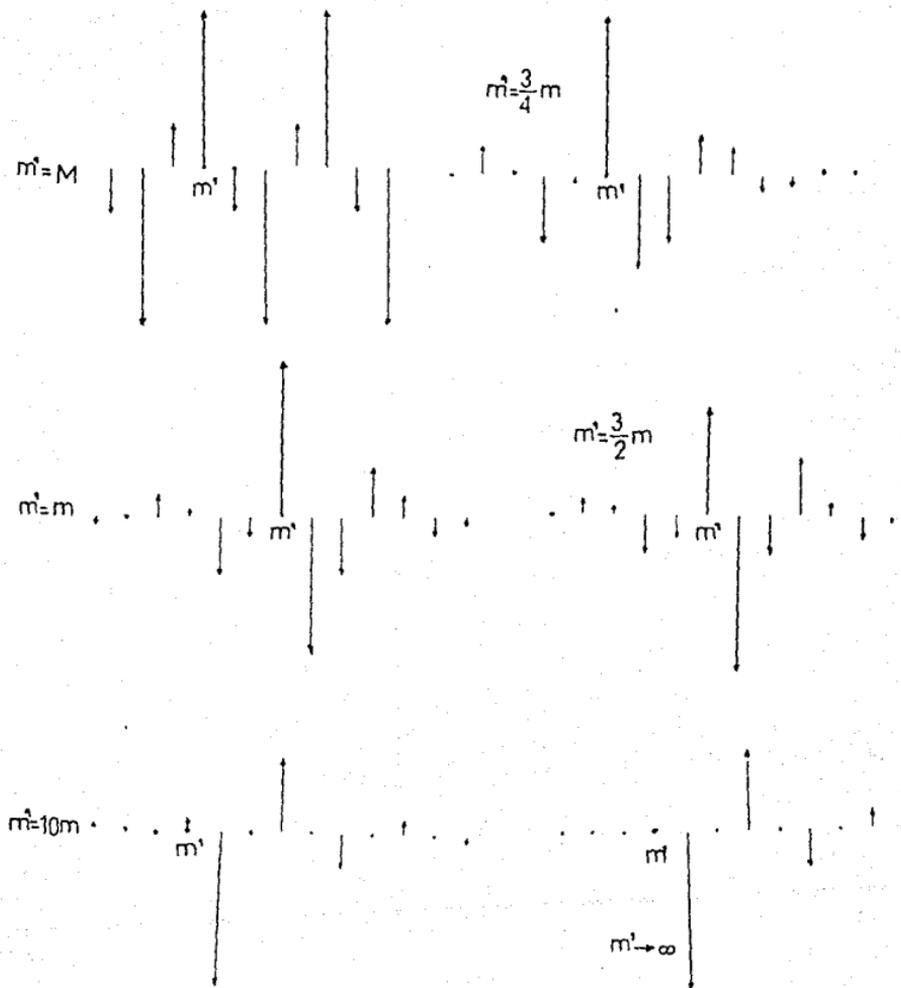


Figura 3.15 Formas de vibración para el modo de tipo brecha, cuando $m \gg m' > M$, $m' \gg M$, $\varepsilon = 1/2$, $\rho = 1/2$.

Del conjunto de gráficas de la figura 3.15, se observa que cuando el valor de la masa impureza toma un valor intermedio entre los átomos de la red, ésta oscila en sentido opuesto al de los átomos más próximos, presentando la mayor amplitud de oscilación. Además cuando el valor de la masa impureza es superior a las masas de la red, ésta oscila en sentido opuesto a los átomos más próximos, teniendo una amplitud de oscilación mayor los átomos ligados con la constante de interacción mayor K . Cuando la impureza es mucho más grande que los átomos de la red, se observa que los átomos de la región 2, presentan una mayor localización en sus movimientos, y únicamente oscilan los átomos más pesados de la región 1, estando la masa impureza prácticamente sin movimiento.

Finalmente diremos que los resultados obtenidos para esta red de Hori y Asahi, por lo que se refiere a los modos localizados son semejantes a los estudiados en la primera sección de este capítulo. En el caso de las frecuencias esto puede constatarse si se observan las figuras 3.8 y 3.12 de la red de Hori y Asahi y se comparan con la figura 3.2 de la red monoatómica estudiada en la primera sección. Siempre tenemos un modo de tipo local y dos de tipo brecha.

Para las formas de vibrar, éstas también resultan ser muy parecidas a las que obtuvimos en la primera sección de este capítulo, de las cuales hicimos una descripción muy breve.

De la discusión que hemos dado para esta red, podemos observar y nosotros afirmamos que el caso analizado por Hori y Asahi, usando la matriz de transferencia, y que se presentó en el capítulo 1, está contenido en nuestros resultados. Con esto queremos decir, que no

importa que las diferencias entre las dos masas de los átomos y las dos constantes de interacción sean muy pequeñas, de todas maneras el resultado que nosotros presentamos en esta sección, sigue siendo el mismo. La única diferencia que puede señalarse, es que Hori y Abahi, usaron la condición de frontera cíclica, porque consideraron una red finita. Sin embargo, es ampliamente conocido en la literatura⁽¹⁰⁾ que esta condición de frontera cíclica es equivalente a tener una red infinita, ya que el único efecto que se está evitando es el hecho de tener una superficie en la red.

CONCLUSIONES

En este trabajo hemos calculado las frecuencias y las formas de manera analítica para los modos vibracionales localizados, en una cadena diatómica con interacciones a primeros vecinos, que tiene dos constantes de fuerza y una impureza isotópica contenida en ella, usando el método de diferencia finita^(9,12,13).

Encontramos siempre un modo de tipo local y dos de tipo brecha en esta red de Hori y Asahi, que contiene la impureza isotópica. También mostramos las regiones de existencia de ellos y sus formas de vibración.

Como caso particular de la cadena de Hori y Asahi, analizamos un tipo de cadena monoatómica, con una masa imperfección isotópica y dos constantes de interacción a primeros vecinos. Problema que hasta donde nosotros conocemos, no ha sido presentado por otros autores en la literatura. Es notable que los resultados para esta red fueron semejantes a los obtenidos en el caso anterior.

BIBLIOGRAFIA

- 1.- Patterson J.D., Introduction to the theory of Solid State Physics, Addison - Wesley Publishing Company, 1971.
- 2.- Maradudin A.A., Solid State Phys., 19 1 (1967).
- 3.- Vandevyver M., Talwar D.N., Plumelle P., Kunc K. and Zigone M., Phys. Status Solidi, b 99 727 (1980).
Grimm A., Maradudin A.A., Ipatova I.P. and Subashiev A.V., J. Phys. Chem. Solids., 33 775 (1972).
Sievers A.J., Maradudin A.A. and Jaswal S.S., Phys. Rev., 138 A272 (1965).
- 4.- Lieb E.H. and Mattis D.C., Mathematical Physics in One Dimension, Academic Press, New York, 1966.
- 5.- Bernasconi J. and Schneider T., Physics in one dimension (Springer, Berlin, 1981).
- 6.- Schaefer G., Phys. Chem. Solids, 12 233 (1960)
- 7.- Barker A.S. Jr. and Sievers A.J., Rev. Mod. Phys., 47 Suppl. No.2 (1975).
- 8.- Lifshitz I.M., J. Phys. USSR 7 211, 249 (1943); J. Phys., USSR 8 89 (1944).
- 9.- Andrade L., J. Phys. Condens. Matter, 1 2163 (1989).
- 10.-Hori J. and Asahi T., Prog. Theor. Phys. 17 523 (1957).
- 11.- Kittel C., Introduction to Solid State Physics, Third Edition, Jhon Wiley and Sons, Inc., New York, 1966.
- 12.- Andrade L. and Sanchez M., Internat. J. Quantum

Chem., 36 553 (1989).

- 13.- Andrade L., Recent Progress in Many-Body Theories, Springer-Verlag, Berlin, 142 309 (1981).
- 14.- Dean P., J. Inst. Math. Applic., 3 98 (1967).
- 15.- Aldana H.A., Tesis profesional, FACUNAM, Modos Locales en Silicio y Germanio, Septiembre 1977.
- 16.- Born M., Proc. Phys. Soc. (London), 54, 362 (1942).