

1-29



Universidad Nacional Autónoma de México

FACULTAD DE CIENCIAS

OBTENCION DE MODOS LOCALIZADOS  
A TRAVES DE LA MATRIZ  $C$ .

TESIS PROFESIONAL

CARLOS HERNANDEZ SAAVEDRA

Cd. Universitaria, D. F.

1988



Universidad Nacional  
Autónoma de México



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

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

Todo el material contenido en esta tesis 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:

Dedicatoria y Agradecimiento.	
Introducción . . . . .	1
Capítulo I :- Vibraciones en las redes y Propiedades Térmicas. . . . .	7
Capítulo II :- Técnica de la Matriz $S$ en Problemas de Vibraciones. . . . .	16
Capítulo III.- Técnica de la Matriz $C$ , su Fundamento Matemático. . . . .	32
Capítulo IV.- Algunas Aplicaciones de la Técnica de la Matriz $C$ . . . . .	46
Conclusión . . . . .	57
Referencias . . . . .	60

# INTRODUCCIÓN

## INTRODUCCIÓN

En física, un sólido se puede estudiar como un sistema de muchas partículas, colocadas todas ellas en una estructura cristalina; si todas las moléculas o átomos son idénticos, a dicha estructura se le da en llamar "Cristal Puro", y en caso contrario "Cristal Defectuoso" ó "Cristal con Impurezas".

Los efectos producidos en las frecuencias de los modos normales de vibración de un sistema de partículas, debido a la existencia de impurezas o defectos en la estructura, fueron estudiados teóricamente en 1890 por Lord Raleigh, y el resultado obtenido del mismo que, algunos modos de vibración encontrados, tienen frecuencias fuera de la banda permitida, sin embargo es-

te resultado no se observó experimentalmente sino hasta 1958. En otras palabras, la presencia de impurezas o defectos en un cristal son causales del cambio en los modos vibracionales del cristal puro, teniendo como resultado modos vibracionales cuyas frecuencias se localizan por encima de la banda permitida, es decir, en la brecha prohibida, a los que se les ha dado el nombre de "Modos Localizados", debido a que su energía, localizada en la propia impureza, es grande y cae rápidamente en los vecinos cercanos.

En la actualidad se tienen detectados varios tipos de modos localizados, los de alta frecuencia cuya existencia se encuentra fuera de la banda permitida (en la brecha prohibida), los de baja frecuencia los cuales se encuentran dentro de la banda permitida; también existen los llamados "Modos Resonantes", introducidos recientemente en astrofísica, empleados estos últimos en dar una explicación acerca del incremento en la emisividad en el lejano infrarrojo de las concentraciones interestelares. En otros estudios, y de manera inversa, se emplean los modos localizados como un método de identificación de impurezas en los sólidos.

El estudio actual de los modos localizados, aún cuando se ha intensificado en el transcurso de los últimos años, sin embargo hay todavía mucho que hacer en este sentido ya que ello nos da la oportunidad de conocer con

mas detalle el comportamiento de la materia . Existen varios métodos para abordar estos problemas entre otros están: la función de Green , la matriz de dispersión y el método de la onda reflejada .

En particular el método de la matriz de dispersión fue introducido por vez primera en 1949 por Saxon y Hutner<sup>(1)</sup> , para resolver el problema de una red cristalina monoatómica unidimensional concerniente a estados electrónicos . En 1953 , Slater trata el problema de los niveles de energía para una impureza , empleando las ecuaciones de diferencias . También en 1953 y 1954 , Melvin Lax y Smith<sup>(2)</sup> , tratan el problema de perturbaciones localizadas, por medio de matrices . Montroll y Potts<sup>(3)</sup> , en 1955 , resuelven el problema de los defectos y sus efectos , usando el método de la función de Green . En 1957 , Hori y Asahi<sup>(4)</sup> , publican un artículo en donde tratan las vibraciones desordenadas de una red lineal con el método de la matriz de transparencia , éste método también es usado en 1962 por Fukuda<sup>(7)</sup> , junto con el método de la matriz de dispersión , para resolver el problema de una red monoatómica infinita con una impureza en el centro , en este mismo trabajo demuestra que ambos métodos son equivalentes . Nuevamente en 1964 , Hori y Asahi<sup>(6)</sup> publican un trabajo en el que usan la matriz de dispersión para resolver el problema de modos de superficie cuyos efectos son estudiados por Wallis<sup>(9)</sup> en el mismo año . En 1976 Andrade y Saavedra<sup>(10)</sup> usando la matriz de dispersión , analizan el efecto de una impureza sobre las fre -

cuencias de vibración de una red lineal ; a diferencia de Fukuda quien trata el mismo problema pero únicamente cambia la masa del átomo impureza, aquí se modifican también las interacciones de éste átomo con sus vecinos mas cercanos.

El presente trabajo de tesis pretende, por un lado dar a conocer la estructura teórica de un nuevo método para el tratamiento de modos localizados, llamado Técnica de la matriz  $C$ , así como su relación con otras técnicas; y por otro lado dar a conocer la aplicación de dicha técnica en la resolución de algunos problemas obteniendo soluciones analíticas para la existencia de los modos localizados y sus frecuencias.



CAPÍTULO I

## CAPÍTULO III

### VIBRACIONES EN LAS REDES Y PROPIEDADES TÉRMICAS:

En algunos estudios de la Física, y particularmente dentro de la teoría del Estado Sólido, se puede manejar un modelo con la idea de que los átomos en un material sólido tienen un movimiento vibracional constante, cuyas frecuencias y amplitudes se pueden entender fácilmente si las características de este modelo sencillo del sólido, son las siguientes:

PRIMERA: Ninguno de los átomos del sólido se desplaza de su posición de equilibrio, una distancia más allá, de donde sea válida la Ley de Hooke.

SEGUNDA: El movimiento de los átomos está limitado a una dimensión, de tal forma que los átomos del sólido se pueden tratar, como si fueran pequeños osciladores armónicos.

En una dimensión, un oscilador armónico es una partícula de masa  $m$ , oscilando de ida y vuelta alrededor de un origen. En cualquier tiempo está sujeto a una fuerza  $F$  la cual tiende a moverla de regreso hacia el origen y la cual es proporcional al desplazamiento  $x$  desde el origen ( $F = -Kx$ ) por lo que la energía potencial de la partícula es:  $V = \frac{1}{2} Kx^2$

si hacemos el requerimiento que  $V=0$  en el punto  $x=0$ . Entonces tenemos que el Hamiltoniano del oscilador armónico unidimensional es el siguiente:

$$H(x,p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} kx^2 \quad (1)$$

en donde  $p$  es el momento de la partícula cuya masa es  $m$ , y de las ecuaciones de movimiento de Hamilton, la  $x$  y la  $p$  están determinadas por las ecuaciones:

$$\frac{\partial x}{\partial t} = \frac{p}{m} \quad ; \quad \frac{\partial p}{\partial t} = -kx \quad (2)$$

de estas dos últimas ecuaciones tenemos que:

$$\ddot{x} + \omega^2 x = 0 \quad (3)$$

en donde se introdujo además, la frecuencia angular cuya relación es:

$$\omega = (k/m)^{1/2}$$

se puede verificar fácilmente, que la solución general para la ecuación diferencial (3), y por lo tanto para el oscilador armónico, con la condición que  $x(0)=0$ , es la siguiente:

$$x(t) = A \sin \omega t \quad (4)$$

El movimiento de cada pequeño oscilador, queda determinado en forma total, por dos cantidades:  $\omega$ , la cual es llamada la frecuencia angular, y  $A$ , la cual es la amplitud del oscilador. La frecuencia  $\nu$  de las oscilaciones está dada por:

$$\omega = 2\pi\nu$$

de las ecuaciones (2) y (4), obtenemos:

$$p(t) = Am\omega \cos \omega t$$

sustituyendo este último resultado con la solución (4) en la ecuación (1), encontramos que el Hamiltoniano, y consecuentemente la energía, del sistema es:

$$E = H(x,p) = \frac{1}{2} m A^2 \omega^2 \quad \Rightarrow \quad A = (2E/k)^{1/2}$$

con lo que se observa que la energía  $E$  es una función continua de  $\omega$ , una vez fijados los valores de  $m$  y  $A$ .

La energía interna de un sólido radica precisamente, en el movimiento vibracional de sus átomos. Si se altera la temperatura del sólido, también cambia su energía interna y por lo tanto el movimiento vibracional de sus átomos; por lo que la amplitud  $A$  de dicho movimiento tiene que ver con la temperatura del sólido. En otras palabras el calor específico de un sólido es dependiente del movimiento vibracional de sus átomos. En la mayoría de los sólidos, la energía dada a las vibraciones de la red ó cadena de átomos, es la contribución dominante al calor específico.

La energía promedio de un oscilador armónico unidimensional, que está en equilibrio térmico con un gran número de osciladores idénticos, dentro del marco de la mecánica estadística clásica, queda determinada en la siguiente expresión (5):

$$\bar{E}(T) = \frac{\iint E(x,p) \exp[-E(x,p)/k_B T] dx dp}{\iint \exp[-E(x,p)/k_B T] dx dp} \quad (5)$$

sustituyendo la ec. (1) en esta última relación (5), tenemos:

$$\bar{E}(T) = \frac{\int (p^2/2m) \exp(-p^2/2mk_B T) dp}{\int \exp(-p^2/2mk_B T) dp} + \frac{\int (kx^2/2) \exp(-kx^2/2k_B T) dx}{\int \exp(-kx^2/2k_B T) dx}$$

de donde se obtiene que:

$$\bar{E} = k_B T = \frac{1}{2} k A^2$$

y finalmente:

$$\bar{A} = (2 k_B T/k)^{1/2}$$

donde  $k_B$  es la constante de Boltzman,  $T$  la temperatura y  $k$  la constante de la fuerza de Hooke. Esto quiere decir que la temperatura es la cual se espera que se mantenga la equipartición, la energía media de un oscilador armónico lineal es justamente  $k_B T$  ( $k_B T/2$  energía cinética y  $k_B T/2$  energía potencial). Un oscilador armónico isótropo en tres dimensiones

tiene una energía media igual a  $3k_B T$ . Para un sólido que tiene  $N$  átomos por mol, la energía viene dada por :

$$U = 3Nk_B T = 3RT$$

Por lo que, el calor específico del sólido<sup>(6)</sup> tridimensional está dado por :

$$C_V = \left( \frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = 3R$$

Hasta aquí se ha considerado la mecánica de las vibraciones de la red en una forma completamente clásica, la transición hacia la mecánica cuántica se hace con facilidad porque se sabe que los niveles de energía de un oscilador armónico de frecuencia angular  $\omega$  son :

$$E_n = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \quad (6)$$

Puesto que esta ecuación, representa un conjunto de niveles de energía uniformemente espaciados, es posible considerar al estado  $E_n$  como el resultado de sumar  $n$  "cuantos de excitación", cada uno con energía  $\hbar \omega$ , del estado base. Dentro del contexto de la radiación electromagnética de frecuencia angular  $\omega$ ; allí se dice que el estado  $E_n$  corresponde a la presencia de  $n$  fotones, cada uno de energía  $\hbar \omega$ . La realidad de estas partículas portadoras de energía se manifiesta, por ejemplo, en el efecto fotoeléctrico. A menudo resulta conveniente tratar las vibraciones de la red de una manera análoga, e introducir la idea de fonones de energía  $\hbar \omega$ , como cuantos de excitación de la red.

Ya se ha hecho notar, que los niveles de energía de un oscilador armónico cuántico están dados por la ecuación (6); ahora tenemos que, la energía promedio  $\bar{E}$  en equilibrio térmico a la temperatura  $T$  está dado por :

$$\bar{E} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \exp \left[ - \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega / k_B T \right]}{\sum_{n=0}^{\infty} \exp \left[ - \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega / k_B T \right]}$$

Esta energía promedio se puede interpretar fácilmente en términos de fonones, ya que el oscilador se comporta como una serie de cuantos o fonones de energía  $h\nu$ . El número de tales cuantos presentes a la temperatura  $T$  es justamente:

$$n(\nu) = \frac{1}{e^{h\nu/k_B T} - 1} \quad (7)$$

de manera que la energía interna es:

$$U = 3N\bar{E}$$

y por lo tanto el calor específico del sólido viene dado por:

$$C_V = \left( \frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = 3Nk_B \left( \frac{\theta}{T} \right)^2 \frac{e^{\theta/T}}{(e^{\theta/T} - 1)^2} \quad (8)$$

donde  $\theta = h\nu/k_B$ . Esta relación muestra que el calor específico se anula exponencialmente a bajas temperaturas y tiende hacia el valor clásico  $3Nk_B = 3R = 5.96 \text{ cal/mol}^\circ\text{K}$ . a altas temperaturas. Esta primera teoría cuántica del calor específico de los sólidos se debió a Einstein. Él estableció la hipótesis simplificadora extrema de que los  $3N$  modos de vibración de un sólido tridimensional de  $N$  átomos tenían la misma frecuencia, de modo que el sólido completo tenía una capacidad calorífica dada por la ec. (8). Incluso este modelo tan burdo dio el límite correcto a altas temperaturas, una capacidad calorífica atómica de  $3R$ , como fue encontrada primitivamente y en forma empírica por Dulong y Petit. Sin embargo la dependencia respecto a la temperatura cerca de  $T=0$  no concuerda con los resultados experimentales.

Para tratar el problema del calor específico de la red de una forma muy general, la energía interna del cristal se debe obtener realizando una suma sobre todos los modos normales de vibración del cristal. Cada modo normal tiene un número promedio de excitaciones dado por la ec. (7). Si existen  $n_1$  modos normales de frecuencia  $\omega_1$ ,  $n_2$  de frecuencia  $\omega_2$  etc., la energía interna toma la forma:

$$U = \sum_i \frac{n_i \hbar \omega_i}{e^{\hbar \omega_i / k_B T} - 1} \quad (9)$$

en la que se ha prescindido del término correspondiente al punto cero. El número total de modos normales es  $3N'r$ , donde  $N'$  es el número de celdas unitarias en el cristal y  $r$  es el número de átomos por celda unitaria. De esta manera, el número total de modos es muy grande, de hecho, incluso también es grande el número de modos en el dominio de frecuencias comprendido entre  $\omega$  y  $\omega + d\omega$ . Como consecuencia, los números ni pueden expresarse en términos de una función espectral de distribución  $\rho(\omega) d\omega$ . Esta función espectral se define como una fracción de todos los modos en el intervalo de  $\omega$  a  $\omega + d\omega$ . Las magnitudes ni de la ec. (9) se reemplazan por  $3N'r \rho(\omega) d\omega$ . Sustituyendo la sumatoria por la integral, queda:

$$U = 3N'r \int \frac{\hbar \omega \rho(\omega)}{e^{\hbar \omega / k_B T} - 1} d\omega$$

Y derivando con respecto a la temperatura, se obtiene:

$$C_v = \left( \frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = 3N'r k_B \int \frac{(\hbar \omega / k_B T)^2 e^{\hbar \omega / k_B T}}{(e^{\hbar \omega / k_B T} - 1)^2} \rho(\omega) d\omega \quad (10)$$

Para calcular esta integral debe encontrarse el espectro de frecuencias  $\rho(\omega)$  a partir de una solución completa del problema de la dinámica de redes. El problema es complicado, aun cuando fue intentado con cierto éxito por Born y Karman y Blackman más tarde. Actualmente el problema puede abordarse con la ayuda de métodos numéricos. Aun mejor que proceder de esta manera, es considerar la aproximación hecha por Debye.

Peter Debye consideró al sólido como un cuerpo elástico continuo y no como una serie de átomos vibrando in-

dependientemente de sus vecinos, por lo que la energía interna de un sólido se establece como ondas elásticas con energía cuantizada, siendo el fonón el cuantum de energía vibracional en el sólido. En el razonamiento de la aproximación de Debye, la red se reemplaza por un continuo isotrópico elástico. Solamente se consideran los modos acústicos y se desprecia la dispersión; es decir, las curvas que dan las frecuencias en función del número de onda cuya forma es:

$$\omega = v_0 k$$

donde  $v_0$  es una constante. La red sin embargo, está formada por un número discreto de partículas, por lo que debe haber una longitud de onda mínima aproximadamente igual a la distancia entre los átomos. Este hecho se toma en consideración cortando el vector de onda en  $k_m$  que origina la frecuencia correspondiente  $\omega_m$  máxima. En una teoría más exacta, debería ser la frontera de la primera zona de Brillouin la que limitara el intervalo permitido para el vector  $\vec{k}$ . En esta teoría del continuo de Debye se reemplaza la zona de Brillouin por una esfera de Debye que contiene el mismo número de puntos (modos permitidos) en el espacio  $K$  que la zona de Brillouin. La función espectral, obtenida por Debye, es entonces:

$$\rho(\omega) d\omega = \frac{3\omega^2}{\omega_m^3} d\omega$$

por lo que entonces la ec. (10) da la siguiente expresión para el Calor Específico:

$$C_v = 3R \int_0^{\omega_m} \frac{(\hbar\omega/k_B T)^2 e^{\hbar\omega/k_B T} 3\omega^2}{(e^{\hbar\omega/k_B T} - 1)^2 \omega_m^2} d\omega$$

donde  $R$  es la constante de los gases por mol y donde se ha reemplazado  $N'r$  por  $N$  el número de átomos por mol. La frecuencia máxima en la integral se encuentra haciendo  $N$  el número total de puntos dentro de la esfera de Debye igual a:

$$N = \frac{4}{3} \pi k_m^3 \frac{V}{8\pi^3}$$

con lo que:

$$\omega_m = v_0 k_m = v_0 (6\pi^2 N/V)^{1/3}$$



conviene hacer  $x = \hbar \omega / k_B T$  y definir la temperatura característica  $\theta$  de Debye a partir de la siguiente relación

$$x_m = \frac{\hbar \omega_m}{k_B T} = \frac{\theta}{T}$$

por lo que el calor específico puede escribirse en la forma siguiente:

$$C_v = 9R \left( \frac{T}{\theta} \right)^3 \int_0^{x_m} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx$$

este resultado tiende a cero como  $T^3$  para  $T \ll \theta$ , de acuerdo con el resultado experimental (como puede verse haciendo infinito el límite superior de la integral y calculando esta). También conduce  $C_v \cong 3R$  a temperaturas altas, de acuerdo con la Ley de Dulong y Petit.

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

CAPÍTULO III

## CAPITULO II

### TÉCNICA DE LA MATRIZ "S" EN PROBLEMAS DE VIBRACIONES :

Cuando los átomos de una red, vibran alrededor de sus posiciones de equilibrio, realizando movimientos periódicos alrededor de dichas posiciones, para desplazamientos pequeños podemos suponer que las fuerzas entre átomos circunvecinos están descritas por la Ley de Hooke, además de considerar, en este modelo teórico, solamente las interacciones entre los primeros vecinos ó vecinos mas cercanos. Con todas estas consideraciones, la fuerza sobre el enésimo átomo de una cadena unidimensional infinita, de estas partículas es, en esta aproximación semiclásica :

$$F_n = \gamma(U_{n+1} + U_{n-1} - 2U_n) \quad (11)$$

donde  $\gamma$  es la constante de Hooke y  $U_n$  el desplazamiento

del enésimo átomo desde su posición de equilibrio

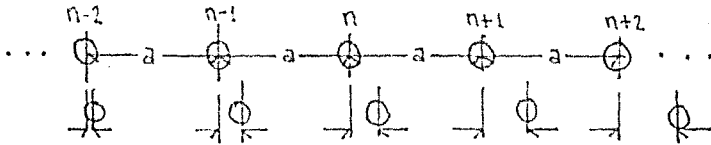


Fig 1. Modelo de una red monoatómica lineal infinita.

De acuerdo a la segunda ley de Newton, esta fuerza se puede expresar como sigue :

$$m \frac{d^2 U_n}{dt^2} = \gamma (U_{n+1} + U_{n-1} - 2U_n) \quad (12)$$

es la ecuación de movimiento, la cual esperamos tenga soluciones periódicas, debido a que los movimientos que realizan los átomos de la red son periódicos, por lo que estas deben ser de la forma :

$$U_n = A e^{i(\omega t - Kna)} \quad (13)$$

en donde  $A$  es la amplitud del movimiento de los átomos,  $\omega$  la frecuencia de vibración,  $K$  el número de onda,  $n$  el número de átomo y  $a$  la distancia interatómica de la red. Diferenciando esta solución dos veces respecto al tiempo y sustituyendo este resultado en la ec. (12) tenemos :

$$-m\omega^2 U_n = \gamma (U_{n+1} + U_{n-1} - 2U_n) \quad (14)$$

Además la solución para  $U_{n+1}$  y  $U_{n-1}$  se puede expresar

ser como sigue :

$$U_{n+1} = A e^{i[\omega t - \kappa(n+1)a]}$$

$$U_{n-1} = A e^{i[\omega t - \kappa(n-1)a]}$$

sustituyendo estas relaciones junto con la forma (13) en la ecuación (14) se obtiene la siguiente relación :

$$m\omega^2 = 2Y(1 - \cos \kappa a) \quad (15)$$

de aquí podemos obtener  $\omega$  en términos de  $\kappa$  :

$$\omega = \sqrt{\frac{4Y}{m}} \left| \sin \frac{1}{2} \kappa a \right| \quad (16)$$

El valor absoluto se hace necesario, debido a que las frecuencias son esencialmente cantidades positivas, independientemente de que el número de onda  $\kappa$  sea positivo o negativo. Esto quiere decir que existen soluciones de ondas planas sin importar que la onda se propague hacia la derecha o hacia la izquierda a lo largo de la cadena, estas ondas son independientes entre sí y la frecuencia  $\omega$  se relaciona con  $\kappa$  por la ec. (16). Esto significa que se trata de un medio de dispersión, cuya relación es precisamente la ec. (16) y cuya gráfica queda representada en la figura 2.

Por lo anterior, es evidente que  $\omega$  no es función lineal de  $\kappa$ , por tal motivo se ve que el medio que se está tratando es dispersivo, como ya se dijo anteriormente; una relación tal como la de la ec. (16) que nos da  $\omega$  en función

de  $k$ , se conoce como relación de dispersión. En esta relación de dispersión se puede notar que para valores de  $k$  mucho

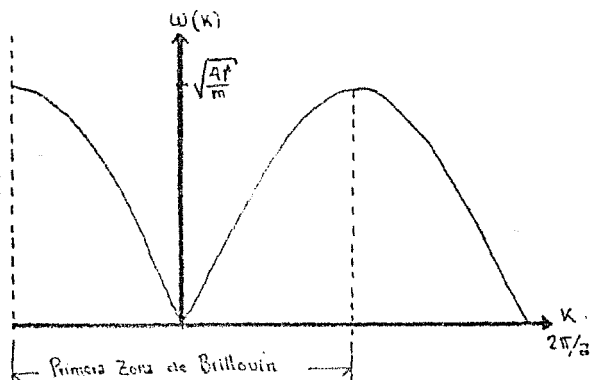


Fig.2.- Representa la relación de dispersión para una red monoatómica lineal. La región de  $k \ll 1/a$  ó  $\lambda \gg a$  corresponde a la aproximación continua, aquí  $\omega$  es directamente proporcional a  $k$ .

menores que  $\pi/a$  (como  $k = 2\pi/\lambda$  esto quiere decir que para valores de  $\lambda$  mucho mayores que dos veces la distancia interatómica  $a$ ),  $\omega$  es aproximadamente lineal con respecto a  $k$ , debido a que  $\sin(ka/2) \cong ka/2$ , esto es:

$$\omega \cong ka \sqrt{f/m}$$

de aquí podemos determinar la velocidad de fase y la velocidad de grupo, dadas por las siguientes relaciones.

$$v_f = \omega/k = a \cdot \sqrt{f/m} = v_0$$

$$v_g = d\omega/dk = a \sqrt{f/m} = v_0$$

Esto quiere decir que para valores pequeños de

$k$ , i.e. longitudes de onda ( $\lambda$ ) grandes, estas velocidades coinciden y son constantes, o bien significa que la dispersión deja de tener interés debido a que el medio se comporta como continuo, homogéneo y elástico. Cuando  $k$  crece, sin embargo, las velocidades de fase y de grupo son diferentes y están dadas por:

$$v_f = \omega/k = v_0 \left| \sin(ka/2) / (ka/2) \right|$$

$$v_g = d\omega/dk = v_0 \left| \cos(ka/2) \right|$$

Esto significa que los efectos de dispersión se hacen considerablemente más importantes al aumentar el valor de  $k$ , y por lo tanto  $\omega$  ya no depende en una forma lineal respecto a éste. Naturalmente existe un valor límite máximo para  $k$ , dado por  $\pi/a$  que corresponde a un valor mínimo para  $\lambda$  dado por  $2a$ . Y por lo tanto, para todos los valores de  $k$  permitidos entre  $-\pi/a$  y  $\pi/a$ , existe un valor de  $\lambda$  correspondiente y por ende una frecuencia de vibración  $\omega$ , a la que llamamos modo normal de vibración de la cadena. Los valores extremos son  $k_{\text{máx}} = \pm \pi/a$  en el límite  $a \rightarrow 0$  para el medio continuo y  $k_{\text{máx}} \rightarrow \pm \infty$  los valores de  $k$  fuera de la primera zona de Brillouin nuevamente reproducen movimientos de la red descritos por valores dentro de los límites  $\pm \pi/a$ .

Por otra parte, cuando en una cadena monoatómica infinita se pierde la regularidad perfecta debido a la presencia de un átomo impureza, por esta razón existe un

centro dispersor, diferente a todos los demás átomos de la red, ver fig. 3, por lo que las ondas vibracionales viajando a lo largo del cristal en direcciones opuestas antes y después de la impureza deben acoplarse, este acoplamiento se puede expresar en términos de la matriz "S".

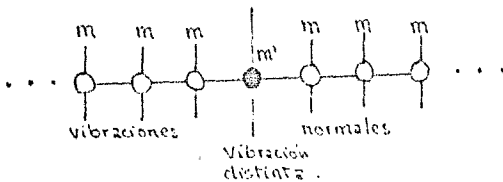


Fig. 3 - Muestra la pérdida de regularidad de una cadena lineal infinita, debido a una impureza de masa  $m'$ .

Podemos pensar que el centro dispersor, es como un potencial que dispersa las ondas vibracionales que viajan en direcciones opuestas. Este centro dispersor ó impureza debe tener una condición de frontera que afecta a las soluciones de la ecuación de diferencias de la red, por lo que debemos esperar un comportamiento vibratorio diferente, así que se puede encontrar la frecuencia  $\omega$  para el modo vibracional que resulta debido a la presencia de la impureza, empleando el método de la matriz de dispersión.

Para ejemplificar el método de la matriz de dispersión en problemas de vibraciones, consideremos el problema de una red monoatómica infinita con una impureza en el centro; geométricamente proponemos el modelo que se muestra en la fig. 4. En este modelo, los átomos re



gulares de la red están numerados y tienen una masa  $M$ , el átomo impureza se encuentra localizado en la posición cero, teniendo una masa  $M'$ . Se muestran también en la figura, las ondas vibracionales entrantes y salientes de la impureza, por medio de las flechas dibujadas a los lados de la misma.

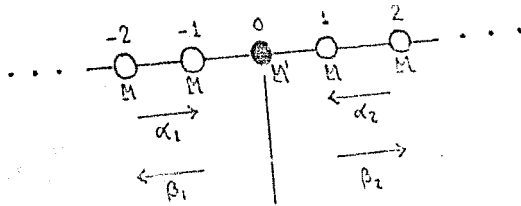


Fig. 4 : Modelo de una red monoatómica unidimensional infinita con una impureza en el centro.

Las ecuaciones de movimiento para este sistema de átomos regulares y de impureza de la red, son respectivamente

$$M\omega^2 U_n + \gamma [U_{n+1} + U_{n-1} - 2U_n] = 0 \quad \forall n \neq 0 \quad (17)$$

$$M'\omega^2 U_0 + \gamma [U_1 + U_{-1} - 2U_0] = 0 \quad \text{para } n=0 \quad (18)$$

en las que, nuevamente,  $U$  es el desplazamiento de la posición de equilibrio de cada átomo,  $\omega$  la frecuencia de vibración,  $\gamma$  es la constante de la fuerza de Hooke entre los átomos, y en donde supondremos, para efectos de cálculo, que el parámetro de la red es igual a 1. Siguiendo el trabajo -

de Fukuda<sup>(7)</sup>, se propone la solución siguiente :

$$U_n = \begin{cases} \alpha_1 e^{ikn} + \beta_1 e^{-ikn} & \forall n \leq 0 \\ \alpha_2 e^{-ikn} + \beta_2 e^{ikn} & \forall n \geq 0 \end{cases} \quad (19)$$

sustituyendo la solución en la ec. (17) se obtiene, la ya conocida, relación de dispersión para el cristal infinito :

$$M\omega^2 = 2V(1 - \cos k) \quad (20)$$

Como en el átomo impureza debe haber continuidad en su máximo desplazamiento, tenemos que :

$$\alpha_1 + \beta_1 = \alpha_2 + \beta_2 \quad (21)$$

Las ecuaciones (18) y (21) juntas constituyen las condiciones de frontera del problema. Tenemos un sistema de dos ecuaciones con cuatro incógnitas, por lo que podemos expresar dos de ellas en términos de las otras dos, en particular  $\beta_1$  y  $\beta_2$  en términos de los coeficientes  $\alpha_1$  y  $\alpha_2$ , haciendo las operaciones y expresando el resultado en términos de matrices, tenemos :

$$\begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} \quad (22)$$

donde la matriz  $S$  está dada por :

$$S = \begin{pmatrix} -\frac{M'\omega^2 + \gamma(e^{ik} + e^{-ik} - 2)}{M'\omega^2 + 2\gamma(e^{ik} - 1)} & -\frac{\gamma(e^{-ik} - e^{ik})}{M'\omega^2 + 2\gamma(e^{ik} - 1)} \\ -\frac{\gamma(e^{-ik} - e^{ik})}{M'\omega^2 + 2\gamma(e^{ik} - 1)} & -\frac{M'\omega^2 + \gamma(e^{ik} + e^{-ik} - 2)}{M'\omega^2 + 2\gamma(e^{ik} - 1)} \end{pmatrix} \quad (23)$$

Esta matriz contiene la dinámica del problema. Sus elementos tienen la peculiaridad de que:  $S_{11} = S_{22}$  y  $S_{12} = S_{21}$  en otras palabras, esta matriz es simétrica, lo cual significa que existe una invarianza bajo reflexión, en otras palabras, sería lo mismo si hubiésemos considerado, que las ondas que salen fuesen las ondas que entran y viceversa. Esto se verá en la fig. 4, si las flechas se indicaran en la dirección opuesta.

La matriz  $S$  nos relaciona los coeficientes de las ondas entrantes con los coeficientes de las ondas que salen de la impureza, teniendo como propiedades la de ser simétrica y unitaria, entre otras. En nuestro caso, es evidente que la matriz  $S$ , tiene la propiedad de ser simétrica.

Ahora bien, por continuidad tenemos que:

$$\alpha_1 + \beta_1 = \alpha_2 + \beta_2$$

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

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

si aplicamos esto a la ecuación (22) tenemos:

$$\begin{pmatrix} \beta_1^* & \beta_2^* \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_1^* & \alpha_2^* \end{pmatrix} \cdot \bar{S}^* \cdot S \cdot \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} \quad (24)$$

donde  $(\beta_1^* \beta_2^*)$ ,  $(\alpha_1^* \alpha_2^*)$  y  $\bar{S}^*$  son las transpuestas conjugadas de las matrices  $\begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix}$ ,  $\begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix}$  y  $S$  respectivamente,

esto significa que para que exista continuidad en el flujo se debe cumplir que:

$$\bar{S}^* \cdot S = \mathbb{1}$$

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

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

o lo que es lo mismo, el producto  $\bar{S}^* \cdot S$  nos da la matriz identidad, por lo tanto la ec. (24) se cumple. Así que, estas condiciones nos dicen que la matriz  $S$  tiene las siguientes propiedades: es simétrica y su inversa es igual a su hermitiana conjugada ya que sus elementos están sujetos a las condiciones:

$$S_{11}^2 + S_{21}^2 = 1 \quad ; \quad S_{12}^2 + S_{22}^2 = 1$$

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

recordemos también que, si el producto de dos matrices conmuta y es igual a la unidad, una matriz es inversa de la

otra, la matriz  $S$  tiene todas estas características y por lo tanto, como ya dijimos antes, contiene la dinámica del problema.

La ecuación (22) representa aquí, una transformación lineal, donde la matriz  $S$  tiene toda la información sobre el centro dispersor. Se puede encontrar la relación de dispersión  $\omega$ , en función del número de onda  $K$ , y con ello la frecuencia vibracional del átomo impureza. Un modo localizado alrededor de la impureza se debe caracterizar como un estado estacionario sin ondas incidentes, tal estado estacionario puede ser obtenido por la condición de que cada elemento de  $S$  llegue a ser infinito, notaremos que esta puede hacerse singular con solo igualar el denominador común de cada elemento de  $S$ , con cero, esto es:

$$M^2 \omega^2 + 2\gamma^2 (e^{iK} - 1) = 0 \quad (25)$$

Esto quiere decir que las amplitudes de las ondas salientes  $\beta_1$  y  $\beta_2$ , serían infinitas con respecto a las amplitudes  $\alpha_1$  y  $\alpha_2$  de las ondas entrantes a la impureza, lo cual es físicamente inaceptable, entonces, para que se obtengan ondas salientes de amplitudes finitas, las amplitudes de las ondas entrantes deberán ser iguales a cero, mas aún, si el número de onda fuera  $K$  real, querría decir que la impureza es una fuente emisora de ondas cuyas amplitudes son  $\beta_1$  y  $\beta_2$ , lo cual tampoco es aceptable físicamente, por lo que  $K$  debe ser complejo y

se describen así ondas atenuadas hacia los lados del átomo impureza colocado en el centro del cristal, ver fig. 5.

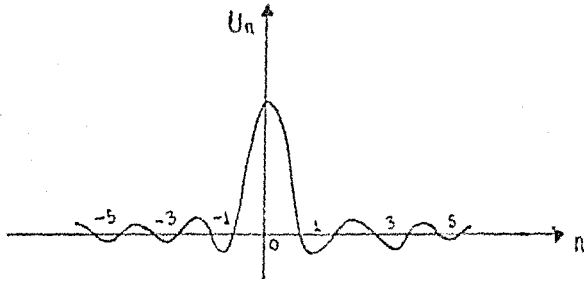


Fig. 5: Se muestran las ondas atenuadas salientes en un cristal con la impureza colocada en el centro del mismo.

Si siguiendo ahora con el problema de la impureza, tenemos hasta este momento, dos ecuaciones que relacionan a la frecuencia  $\omega$ , las ecuaciones (20) y (25); resolviendo este sistema de ecuaciones eliminando a  $\omega$ , encontramos:

$$1 - \frac{M'}{M} (1 - \cos k) - e^{ik} = 0 \quad (26)$$

ahora bien,  $k$  debe ser complejo, así que hacemos  $k = \mu + i\theta$ . Sustituyendo el valor de  $k$  en la ecuación (26) y haciendo algunos cálculos, obtenemos la siguiente expresión:

$$Q e^{2\theta} + 2(Q-1) e^{\theta} + Q-2 = 0 \quad (27)$$

donde  $Q = M'/M$ , las soluciones de esta última ecuación, nos debe dar las frecuencias de los modos loca

lizados debido a la impureza. Las soluciones de la ecuación (27) son:

$$y \quad e_1^{\theta} = -1$$

$$e_2^{\theta} = \frac{2 - Q}{Q}$$

la solución  $e_1^{\theta}$  no da modos localizados, por lo que en este caso solo existe un modo localizado con una frecuencia asociada a la solución  $e_2^{\theta}$ .

La condición de existencia del modo localizado es la siguiente:

En realidad como  $\theta > 0$  entonces  $e^{\theta}$  debe ser mayor que 1, por lo que la solución  $e_2^{\theta}$  debe ser mayor que 1, esto quiere decir que  $M' < M$ . Con todo esto podemos decir que la frecuencia del modo localizado se encuentra ubicada en la banda prohibida del cristal perfecto, ver fig. 6; es decir, que los modos de vibración con valor de frecuencia en la banda prohibida se llaman "Modos Localizados". Así, podemos afirmar que hacer singular a la matriz  $S$  implica encontrar la ecuación de eigenvalores de la frecuencia y de ahí las condiciones de existencia para los modos localizados.

$0 < Q < 1$	$e^{\theta} = \frac{2-Q}{Q}$	$\omega^2 \left[ \frac{M}{\mu} \right] = \frac{2}{Q} \left[ 1 + \frac{1}{P_0^2} \right]$
0.2	9	11.111
0.4	4	6.25
0.6	2.333	4.76
0.8	1.5	4.166
1	1	4

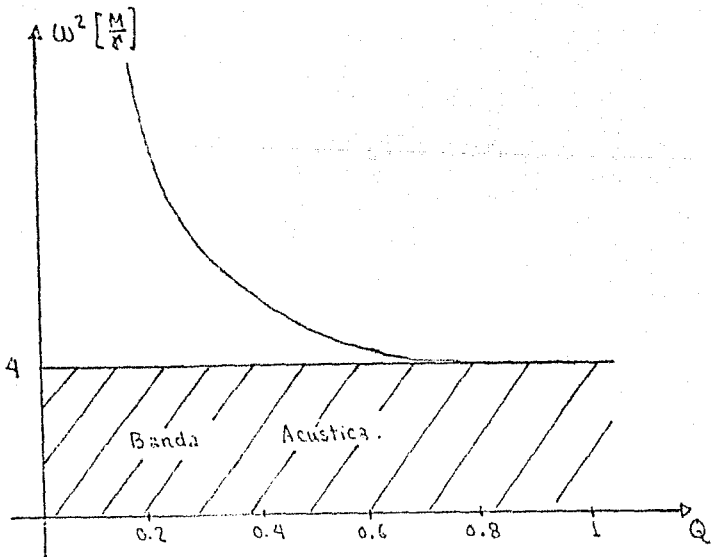


Fig. 6 :- Se muestra la gráfica de los posibles valores que  $\omega^2 \left[ \frac{M}{\mu} \right]$  puede tomar del modo localizado, para valores permitidos de  $Q$ . Estos, localizados en la banda prohibida.



RESUMEN: En este capítulo hemos definido a la matriz  $S$  y también se han mostrado algunas de sus propiedades. También hemos calculado esta matriz en el caso, estudiado por Fokuda<sup>(7)</sup>, de una imperfección localizada en el centro de un cristal infinito, la imperfección fue descrita por un átomo que tiene masa diferente a la de los átomos regulares del cristal perfecto. Para encontrar los modos localizados que son producidos por la presencia de la impureza se hizo singular a la matriz  $S$  y de ahí se calculó la ecuación de eigenvalores para la frecuencia. También se mostró la condición de existencia para el modo localizado.

CAPÍTULO III

## CAPÍTULO III

### TÉCNICA DE LA MATRIZ "C". SU FUNDAMENTO MATEMÁTICO.

Después de que fue introducida por Fukuda<sup>(7)</sup>, para resolver el problema de una cadena lineal monoatómica infinita con una impureza al centro, la matriz de dispersión  $S$  fue usada por Hori y Asahi<sup>(4)</sup> para resolver problemas de superficie con y sin impurezas, este trabajo contempla la solución de problemas como el de una cadena unidimensional con una y dos impurezas isotópicas en la superficie, entre otros. Inclusive en 1978, Andrade y Zurita<sup>(11)</sup>, con este método de la matriz de dispersión  $S$ , resuelven el problema de modos localizados en la interfase de dos cristales.

Ahora bien, como vimos en el capítulo anterior, la técnica de la matriz  $S$  aplicada a problemas de vibraciones de una red, y particularmente en el caso de obten-

ción de modos localizados debido a la presencia de imperfecciones. Llamadas impurezas, consiste en: construir la matriz  $S$  a partir del conjunto de ecuaciones llamadas condiciones de frontera del problema, esta matriz de transformación  $S$  expresa los coeficientes o amplitudes de las ondas salientes del elemento dispersor, en términos de los coeficientes o amplitudes de las ondas entrantes, esto es:

$$\beta_1 = S_{11} \alpha_1 + S_{12} \alpha_2 + \dots + S_{1n} \alpha_n$$

$$\beta_2 = S_{21} \alpha_1 + S_{22} \alpha_2 + \dots + S_{2n} \alpha_n$$

$$\vdots \quad \quad \quad \vdots \quad \quad \quad \vdots \quad \quad \quad \vdots$$

$$\beta_n = S_{n1} \alpha_1 + S_{n2} \alpha_2 + \dots + S_{nn} \alpha_n$$

que en forma matricial quedaría como sigue:

$$\vec{\beta}' = \tilde{S} \cdot \vec{\alpha}' \quad (28)$$

donde  $\tilde{S}$  es una matriz cuadrada de orden  $n$ ,  $\vec{\alpha}'$  y  $\vec{\beta}'$  son los vectores transpuestos de  $\vec{\alpha}$  y  $\vec{\beta}$  donde:

$$\vec{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)$$

y

$$\vec{\beta} = (\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_n)$$

De hecho, la dificultad principal al aplicar el método de la matriz  $S$  es expresar las  $\beta$ s en términos de las  $\alpha$ s a partir de las condiciones de frontera del problema, sobre todo en problemas vibratorios de redes en donde las ecuaciones que constituyen las condiciones de

frontera dan origen a una matriz de dispersión de orden mayor de dos.

Posteriormente, se buscan los polos de la matriz de transformación  $\tilde{S}$ , para los cuales dicha matriz deja de ser regular, i.e. condiciones para las cuales la matriz de transformación  $\tilde{S}$  es singular. Ya que éstas últimas, nos dan también las condiciones para la existencia de los modos localizados. Y esto se tiene que obtener sin hacer las amplitudes de las ondas salientes  $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_n$  infinitas con respecto a las amplitudes  $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$  de las ondas entrantes a la impureza, lo cual sería físicamente inaceptable.

La dificultad para obtener la matriz de transformación  $\tilde{S}$ , radica en el siguiente hecho: las ecuaciones que constituyen las condiciones de frontera del problema (en el caso del problema que se resolvió en el capítulo anterior, de modos localizados en una cadena lineal monoatómica infinita con un átomo impureza en el centro, serían las ecuaciones (18) y (21).), nos dan en forma inmediata un sistema de ecuaciones de la forma siguiente:

$$\begin{aligned} c_{11} \beta_1 + c_{12} \beta_2 + \dots + c_{1n} \beta_n &= b_{11} \alpha_1 + b_{12} \alpha_2 + \dots + b_{1n} \alpha_n \\ c_{21} \beta_1 + c_{22} \beta_2 + \dots + c_{2n} \beta_n &= b_{21} \alpha_1 + b_{22} \alpha_2 + \dots + b_{2n} \alpha_n \\ \vdots & \\ c_{n1} \beta_1 + c_{n2} \beta_2 + \dots + c_{nn} \beta_n &= b_{n1} \alpha_1 + b_{n2} \alpha_2 + \dots + b_{nn} \alpha_n \end{aligned}$$

el cual tiene una representación matricial como sigue:

$$\tilde{C} \vec{\beta}' = \tilde{B} \vec{\alpha}' \quad (29)$$

donde  $\tilde{C}$  y  $\tilde{B}$ , son las matrices cuadradas de orden  $n$ , si-  
quientes:

$$\tilde{C} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & \dots & c_{1n} \\ c_{21} & c_{22} & \dots & c_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ c_{n1} & c_{n2} & \dots & c_{nn} \end{bmatrix}$$

y

$$\tilde{B} = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & \dots & b_{1n} \\ b_{21} & b_{22} & \dots & b_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ b_{n1} & b_{n2} & & b_{nn} \end{bmatrix}$$

lo cual significa que para poder resolver la ecuación matri-  
cial (29), despejando al vector transpuesto  $\vec{\beta}'$ , tenemos  
que determinar  $\tilde{C}^{-1}$  (la inversa de la matriz  $\tilde{C}$ ).  
Con la cual aplicándola en ambos lados de la ec. (29), te-  
nemos:

$$\vec{\beta}' = \tilde{S} \vec{\alpha}'$$

en donde:

$$\tilde{S} = \tilde{C}^{-1} \cdot \tilde{B} \quad (30)$$

La dificultad fundamental que existe para  
obtener a  $\tilde{S}$  radica, precisamente, en la dificultad pa-  
ra obtener la inversa de la matriz  $\tilde{C}$ .



Si la transformación (31), transforma  $X_1$  en  $Y_1$  y  $X_2$  en  $Y_2$ , entonces:

i) Transforma  $KX_1$  en  $KY_1$ , siendo  $K$  un escalar cualquiera, y

ii) Transforma  $aX_1 + bX_2$  en  $aY_1 + bY_2$ , siendo  $a$  y  $b$  dos escalares arbitrarios. Por esta razón la transformación se llama Lineal.

Existe el cuerpo de teoremas fundamentales para las transformaciones lineales, algunos de los cuales serán enunciados a continuación.

Si en (31), hacemos  $X = [1, 0, \dots, 0]^T = E_1$ , entonces se tiene a  $Y = [a_{11}, a_{21}, \dots, a_{n1}]^T$ , y en general, si  $X = E_j$ , entonces  $Y = [a_{1j}, a_{2j}, \dots, a_{nj}]^T$ .

Por lo que, es evidente que una transformación lineal (31) está determinada únicamente cuando se conocen las imágenes  $Y$  de los vectores de la base, siendo las columnas de  $A$  las coordenadas de las imágenes de dichos vectores.

Esto se puede ver claramente con el siguiente ejemplo: Supóngase que queremos hallar la transformación lineal  $Y = AX$  que transforme  $E_1$  en  $Y_1 = [1, 2, 3]^T$ ,  $E_2$  en  $Y_2 = [3, 1, 2]^T$  y  $E_3$  en  $Y_3 = [2, 1, 3]^T$ ; primeramente tenemos que  $A = [Y_1, Y_2, Y_3]$ , por lo que la ecuación de la transformación lineal es:

$$Y = AX.$$



por lo que :

$$Y = \begin{bmatrix} 1 & 3 & 2 \\ 2 & 1 & 1 \\ 3 & 2 & 3 \end{bmatrix} \cdot X.$$

Recordemos, por otra parte, que la característica o rango de una matriz no nula  $A$  es igual a  $r$  si el determinante de al menos uno de sus menores cuadrados de orden  $r$  es distinto de cero siendo nulos los correspondientes a todos los menores cuadrados de orden  $(r+1)$ , si es que existen. El rango de una matriz nula es cero. Una matriz cuadrada de orden  $n$  se llama regular si su rango es  $r=n$ , es decir, si su determinante es distinto de cero,  $|A| \neq 0$ . En caso contrario,  $A$  recibe el nombre de singular. De la igualdad  $|A \cdot B| = |A| \cdot |B|$  se deduce: el producto de dos o más matrices cuadradas regulares de orden  $n$  es otra matriz regular; el producto de dos o más matrices cuadradas de orden  $n$  es una matriz singular si al menos una de ellas es singular. Ahora bien, una transformación lineal (31), se llama regular si las imágenes de diferentes vectores  $X_i$  son vectores distintos  $Y_i$ . En caso contrario, la transformación se llama singular.

**TEOREMA 1.** - La condición necesaria y suficiente para que una transformación lineal (31), sea regular es que la matriz  $A$  de la transformación sea

ESTA PARTE DEL LIBRO  
SALTA DE LA PAGINA...

regular.

DEMOSTRACIÓN.- Supongamos que  $A$  es una matriz regular y que los vectores transformados de  $X_1 \neq X_2$  son  $Y = AX_1 = AX_2$ . En estas condiciones, la relación  $A(X_1 - X_2) = 0$ , luego entonces el sistema homogéneo de ecuaciones lineales  $A \cdot X = 0$  tiene la solución no trivial  $X = X_1 - X_2$ . Esto es posible si, y solo si,  $|A| = 0$ , en contra de la hipótesis de que  $A$  es una matriz regular.

TEOREMA 2.- Una transformación lineal regular transforma vectores linealmente independientes (dependientes) en vectores linealmente independientes (dependientes)

DEMOSTRACIÓN.- Supongamos que las imágenes  $Y_i = AX_i$  ( $i = 1, 2, \dots, p$ ) de los vectores linealmente independientes  $X_1, X_2, \dots, X_p$  son linealmente dependientes. En estas condiciones existirán escalares  $s_1, s_2, \dots, s_p$ , no todos nulos, de forma que:

$$\sum_{i=1}^p s_i Y_i = s_1 Y_1 + s_2 Y_2 + \dots + s_p Y_p = 0$$

o bien:

$$\sum_{i=1}^p s_i (AX_i) = A(s_1 X_1 + s_2 X_2 + \dots + s_p X_p) = 0$$

como  $A$  es una matriz regular, entonces  $s_1 X_1 + s_2 X_2 + \dots + s_p X_p = 0$ . Pero esto es contrario a la hipótesis de que los vectores  $X_i$  son linealmente

mente independientes. Por lo tanto, los vectores  $Y_i$  son linealmente independientes.

De este último teorema se deduce el siguiente:  
**COROLARIO** - La imagen de un espacio vectorial  $V_n^K(F)$ , respecto de una transformación regular (31), es un espacio vectorial  $V_n^{\tilde{K}}(F)$ , es decir, la dimensión del espacio vectorial es un invariante. En particular, la transformación es una aplicación de  $V_n(F)$  en si mismo.

Y por lo tanto, el conjunto de vectores  $Y_1, Y_2, \dots$   $Y_n$  cuyas componentes son las columnas de  $A$  pueden ser transformados en los vectores  $X_n$  en la base del espacio. A través de la relación

$$X = A^{-1} \cdot Y \quad (32)$$

la cual constituye la transformación inversa de (31), siempre que la matriz  $A$  sea regular.

Y por lo tanto, también es evidente la ley transitiva de las transformaciones:

**L.T.T.** - Si  $Y = A \cdot X$  transforma un vector  $X$  en otro  $Y$  y  $Z = B \cdot Y$  transforma un vector  $Y$  en  $Z$ , entonces  $Z = B \cdot Y = (B \cdot A) \cdot X$  transforma a  $X$  en  $Z$ , siendo, por supuesto,  $X, Y$  y  $Z$  vectores del espacio  $V_n(F)$ .

Regresando al problema inicial y toda vez que el conjunto de ecuaciones que constituyen las condiciones de frontera del problema físico, nos dan en forma in-

mediata un sistema de ecuaciones de la forma: (29), en donde  $\tilde{C}$  y  $\tilde{B}$ , son matrices de transformación de orden  $n$ .

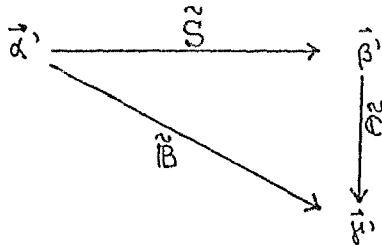
En estas condiciones, si la matriz de transformación  $\tilde{C}$ , transforma a los vectores  $\vec{\beta}'$  en vectores  $\vec{\gamma}'$ , entonces la transformación definida por la matriz  $\tilde{B}$ , transforma a los vectores  $\vec{\alpha}'$  en  $\vec{\gamma}'$ , esto es:

$$\vec{\gamma}' = \tilde{C} \cdot \vec{\beta}'$$

y

$$\vec{\gamma}' = \tilde{B} \cdot \vec{\alpha}'$$

lo cual significa, que ahora tenemos un problema cerrado en cuanto a transformaciones se refiere, ya que:



Aplicando la L.T.T., se pueden transformar los vectores  $\vec{\alpha}'$  en  $\vec{\beta}'$  a través de la aplicación sucesiva de las transformaciones respectivas, primero aplicando la matriz  $\tilde{B}$  seguida de la matriz de transformación  $\tilde{C}^{-1}$ , en donde esta última matriz inversa es tal que:

$$\vec{\beta}' = \tilde{C}^{-1} \cdot \vec{\gamma}'$$

sustituyendo este último resultado en la ec. (28) tene-

mos :

$$\tilde{S} \vec{\alpha}' = \tilde{C}^{-1} \vec{\beta}'$$

de la ec. (29) tenemos que :

$$\tilde{S} \vec{\alpha}' = (\tilde{C}^{-1} \cdot \tilde{B}) \cdot \vec{\alpha}'$$

por lo que finalmente , tenemos :

$$\tilde{S} = \tilde{C}^{-1} \cdot \tilde{B} \quad (33)$$

Viendo la figura de la página anterior , podemos notar que si queremos escoger el camino largo de transformar  $\vec{\alpha}'$  en  $\vec{\beta}'$  , sin emplear directamente la matriz de transformación  $\tilde{S}$  , es necesario , además de tener la matriz  $\tilde{B}$  , determinar la inversa de la matriz de transformación  $\tilde{C}$  , esto es  $\tilde{C}^{-1}$  . Ahora , para que podamos encontrar los modos localizados , es necesario determinar las condiciones adecuadas para que apartir de este camino largo no se dé una transformación regular , para este efecto bastará con exigir que no exista la matriz de transformación  $\tilde{C}^{-1}$  y este camino largo represente una transformación singular , y por lo tanto será suficiente con exigir que la matriz  $\tilde{C}$  sea singular y con este hecho poder encontrar las condiciones de existencia de los modos localizados .

Desde otro punto de vista , podemos evidenciar esta última conclusión , desde que al tomar la relación (33)

$$\tilde{S} = \tilde{C}^{-1} \cdot \tilde{B} .$$

pero por otro lado sabemos que

$$\tilde{\mathcal{C}}^{-1} = \frac{1}{\det \|\tilde{\mathcal{C}}\|} \cdot (\text{adj. } \tilde{\mathcal{C}})$$

entonces :

$$\tilde{\mathcal{S}} = \frac{1}{\det \|\tilde{\mathcal{C}}\|} \cdot (\text{adj. } \tilde{\mathcal{C}}) \cdot \mathcal{B}$$

en donde  $\text{adj. } \tilde{\mathcal{C}}$ , es la matriz adjunta de  $\tilde{\mathcal{C}}$ ; en esta última relación se ve claro que el  $\det \|\tilde{\mathcal{C}}\|$  es denominador común de cada uno de los elementos de la matriz de dispersión  $\tilde{\mathcal{S}}$ , de tal manera que para determinar las condiciones de existencia de los polos de la transformación  $\tilde{\mathcal{S}}$ , es suficiente con exigir que :

$$\det \|\tilde{\mathcal{C}}\| = 0 \quad (34)$$

finalmente podemos llegar a la siguiente conclusión :

" Para poder determinar los Modos Localizados en problemas de vibraciones de una red, en donde las condiciones de frontera del problema, nos remiten a una relación de la forma (29), de manera inmediata, no es necesario construir a la matriz de dispersión  $\tilde{\mathcal{S}}$  y determinar sus polos, es suficiente con exigir las condiciones para las cuales la matriz  $\tilde{\mathcal{C}}$  se hace singular. Y todo esto significa, que es suficiente con exigir que se cumpla la relación (34) "

**RESUMEN:** En este capítulo, primeramente se evidenció la dificultad que presenta la construcción de la matriz de dispersión  $S$  para la obtención de modos localizados en vibraciones de cadenas lineales con imperfección. En segundo lugar, y después de reformar algunos de los teoremas fundamentales de la teoría de las transformaciones lineales, se sentaron las bases que hacen el soporte matemático para la aplicación del método de la matriz  $C$ , la cual resuelve con una mayor sencillez el problema de los modos localizados.

CAPÍTULO III



## CAPÍTULO III

### ALGUNAS APLICACIONES DE LA TÉCNICA DE LA MATRIZ $C$ .

Ahora vamos a mostrar la bondad de la técnica de la matriz  $C$  en algunos casos que ilustrarán la aplicación de este método en problemas de vibraciones de redes lineales con imperfecciones. Los ejemplos de aplicación, que aquí trataremos son problemas que otros autores han resuelto con otras técnicas, sólo que ahora se tiene la pretensión de mostrar la sencillez de la solución que presenta este nuevo método. En primer lugar trataremos el problema de modos localizados en una cadena lineal monoatómica infinita con un átomo impureza en el centro, el cual fue resuelto por Fukuda<sup>(7)</sup> aplicando la técnica de la matriz de dispersión. En segundo lugar vamos a resolver el problema de una cadena unidimensional monoatómica con dos impurezas isotópicas en la superficie. Y como un ter-

cer ejemplo de aplicación se resolverá el problema de una cadena lineal diatómica con una impureza localizada en la superficie. Estos dos últimos problemas fueron resueltos anteriormente por Hori y Asahi (6), aplicando esta técnica.

### PRIMER EJEMPLO:

Empezaremos por aplicar el método de la matriz  $C$ , resolviendo el problema de una cadena lineal monoatómica infinita con una impureza en el centro. Para lo cual proponemos el modelo mostrado en la figura 7. En este modelo los

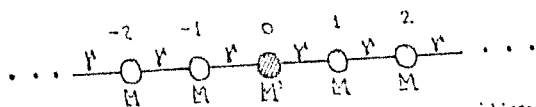


Fig. 7.- Modelo de una red monoatómica unidimensional infinita con una impureza en el centro.

átomos regulares de la red tienen una masa  $M$ , el átomo impureza se encuentra localizado en la posición cero, teniendo una masa  $M'$ . Las ecuaciones de movimiento para este sistema de átomos regulares y de impureza de la cadena, son:

$$M\omega^2 U_n + \gamma[U_{n+1} + U_{n-1} - 2U_n] = 0 \quad \forall n \neq 0 \quad (35)$$

$$M'\omega^2 U_0 + \gamma[U_1 + U_{-1} - 2U_0] = 0 \quad \text{para } n=0 \quad (36)$$

Suponiendo la solución siguiente:

$$U_n = \begin{cases} \alpha_1 e^{ikn} + \beta_1 e^{-ikn} & \forall n \leq 0 \\ \alpha_2 e^{-ikn} + \beta_2 e^{ikn} & \forall n \geq 0 \end{cases} \quad (37)$$

Sustituyendo la solución en la ecuación (35), se obtiene la relación de dispersión para el cristal infinito:

$$M\omega^2 = 2V(1 - \cos k)$$

que es la relación de frecuencias de los modos normales de vibración del cristal perfecto.

Sustituyendo ahora, la solución en la ecuación (36) tenemos:

$$[M\omega^2 + V(e^{ik} - 2)]\beta_1 + V e^{ik} \beta_2 = b_{11}\alpha_1 + b_{12}\alpha_2 \quad (38)$$

Y como en el átomo impureza debe haber continuidad en su máximo desplazamiento, tenemos que:

$$\beta_1 - \beta_2 = -\alpha_1 + \alpha_2 \quad (39)$$

Las ecuaciones (38) y (39), constituyen las condiciones de frontera del problema. Obsérvese que en la primera de estas dos ecuaciones no se escribieron explícitamente los coeficientes de  $\alpha_1$  y  $\alpha_2$ , debido a que no se requieren. Con estas dos ecuaciones tenemos un sistema lineal, cuya expresión matricial es la siguiente:

$$\hat{C} \cdot \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{bmatrix} = \hat{B} \cdot \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{bmatrix}$$

en donde la matriz de transformación  $\tilde{C}$ , tendrá la siguiente forma:

$$\tilde{C} = \begin{bmatrix} 2M^2\omega^2 + 2V(e^{ik} - 2) & 2Ve^{ik} \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$$

Ahora, para determinar los modos localizados debido a la impureza, aplicamos la relación (34) haciendo que  $\det \|\tilde{C}\| = 0$ , obteniendo:

$$M^2\omega^2 + 2V(e^{ik} - 1) = 0$$

la cual es la misma ecuación de valores propios que da la frecuencia del modo localizado, misma que obtuvo Fukuda en su trabajo<sup>(7)</sup> y que fue analizada en el segundo capítulo del presente trabajo, con la diferencia de que aquí se salvó la dificultad de tener que construir la matriz de dispersión  $S$ .

## SEGUNDO EJEMPLO:

Como un segundo ejemplo de aplicación del método de la matriz  $C$ , resolveremos el problema de una cadena unidimensional monoatómica con dos impurezas isotópicas en la superficie, mismo que fue resuelto por Hori y Asahi<sup>(8)</sup> a través de otro método. Para lo cual proponemos el modelo que se muestra en la fig. 8

En este modelo los átomos regulares de la red, tienen una masa  $M$  y su localización ha sido numerada, los átomos impurezas se encuentran localizados en  $N$  y en  $N-1$ , la constante de in-

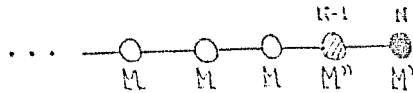


Fig. 8.- Modelo de una cadena lineal monoatómica con dos impurezas en la superficie.

teracción entre átomo y átomo es la misma e igual a  $V$ .

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

$$M\omega^2 U_n + V[U_{n+1} + U_{n-1} - 2U_n] = 0 \quad \forall n \neq N, N-1 \quad (40)$$

$$M''\omega^2 U_{N-1} + V[U_N + U_{N-2} - 2U_{N-1}] = 0 \quad (41)$$

$$M'\omega^2 U_N + V[U_{N-1} - U_N] = 0 \quad (42)$$

suponiendo una solución de la forma:

$$U_n = \begin{cases} \alpha_1 e^{ikn} + \beta_1 e^{-ikn} & \forall n \leq N-1 \\ \alpha_2 e^{ikn} + \beta_2 e^{-ikn} & n = N-1 \end{cases} \quad (43)$$

Sustituyendo esta solución en la ecuación (40) se obtiene la relación de dispersión del cristal perfecto:

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

Ahora sustituyendo la solución en las ecuaciones de movimiento para cada átomo impureza de la superficie, ecuaciones (41) y (42), tenemos:

$$\begin{aligned} [M\omega^2 + \gamma(e^{ik_2} - 2)]e^{-ik(N-1)}\beta_1 + \gamma e^{-ikN}\beta_2 &= b_{11}d_1 + b_{12}d_2 \\ \gamma e^{-ik(N-1)}\beta_1 + [M\omega^2 - \gamma]e^{-ikN}\beta_2 &= b_{21}d_1 + b_{22}d_2 \end{aligned}$$

las cuales quedan expresadas en forma matricial como sigue:

$$\tilde{C} \cdot \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{bmatrix} = \tilde{B} \cdot \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \end{bmatrix}$$

donde  $\tilde{C}$  está dada explícitamente por:

$$\tilde{C} = \begin{bmatrix} [M\omega^2 + \gamma(e^{ik_2} - 2)]e^{-ik(N-1)} & \gamma e^{-ikN} \\ \gamma e^{-ik(N-1)} & [M\omega^2 - \gamma]e^{-ikN} \end{bmatrix}$$

Utilizando la relación (34) para determinar la ecuación de eigenvalores, para cuyas soluciones existen los modos de superficie, esto es: hacer el  $\det. \|\tilde{C}\| = 0$ , tenemos:

$$[M\omega^2 + \gamma(e^{ik_2} - 2)][M\omega^2 - \gamma] - \gamma^2 = 0$$

La cual coincide totalmente con la ecuación obtenida por Hori y Asahi<sup>(8)</sup>, para el mismo problema aplicando otra técnica.

### TERCER EJEMPLO:

En este tercer y último ejemplo de aplicación del método o técnica de la matriz  $\mathbf{C}$ , consideraremos el problema de una cadena lineal diatómica con un átomo impureza en la superficie, también anteriormente resuelto por Hori y Asahi (8) aplicando otra técnica. Como se puede ver en la figura 9, las masas de los átomos regulares en las posiciones pares e impares son  $M_2$  y  $M_1$  respectivamente, y la del átomo impureza, localizada en la superficie (localidad  $2N$ ), es  $M'$ .

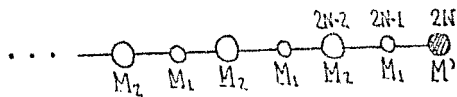


Fig. 9 - Modelo de una red diatómica con una impureza en la superficie.

En este modelo la constante de interacción entre dos átomos vecinos es la misma e igual a  $\gamma$ . Las ecuaciones de movimiento para la parte interna de la red, ver figura 10, del átomo en

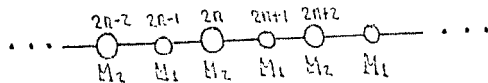


Fig. 10 - Modelo de la parte interna del cristal unidimensional diatómico.

la localidad  $2n-2$  al átomo en la localidad  $2n+1$  son las siguientes:

$$\begin{aligned} M_1 \omega^2 U_{2n+1} + \gamma [U_{2n} + U_{2n+2} - 2U_{2n+1}] &= 0 \\ M_2 \omega^2 U_{2n} + \gamma [U_{2n-1} + U_{2n+1} - 2U_{2n}] &= 0 \\ M_1 \omega^2 U_{2n-1} + \gamma [U_{2n-2} + U_{2n} - 2U_{2n-1}] &= 0 \\ M_2 \omega^2 U_{2n-2} + \gamma [U_{2n-3} + U_{2n-1} - 2U_{2n-2}] &= 0 \end{aligned} \quad (44)$$

Suponiendo una solución de la forma:

$$\begin{aligned} U_{2n+1} &= \alpha_1 e^{ik(2n+1)} + \beta_1 e^{-ik(2n+1)} \\ U_{2n} &= \alpha_2 e^{ik(2n)} + \beta_2 e^{-ik(2n)} \end{aligned} \quad (45)$$

Sustituyendo esta solución en las ecuaciones (44), y después de algunos cálculos, tenemos la bien conocida relación de dispersión para la red diatómica infinita regular:

$$-M_1 M_2 \omega^4 / \gamma^2 + 2(M_1 + M_2) \omega^2 / \gamma = 4 \sin^2 k$$

Las ecuaciones de movimientos para los dos átomos en la superficie son:

$$M' \omega^2 U_{2n} + \gamma [U_{2n-1} - 2U_{2n}] = 0$$

y

$$M_1 \omega^2 U_{2n-1} + \gamma [U_{2n} + U_{2n-2} - U_{2n-1}] = 0$$

Sustituyendo la solución (45) en estas dos últi



mas ecuaciones , tenemos :

$$\gamma e^{-ik(2N-1)} \beta_1 + [M^2 \omega^2 - \gamma] e^{-2ikN} \beta_2 = b_{11} \alpha_1 + b_{12} \alpha_2$$

$$[M_1 \omega^2 - 2\gamma] e^{-ik(2N+1)} \beta_1 + [1 + e^{2ik}] \gamma e^{-2ikN} \beta_2 = b_{21} \alpha_1 + b_{22} \alpha_2$$

Las cuales expresadas en forma matricial , quedan de la forma siguiente :

$$\tilde{C} \cdot \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{bmatrix} = \tilde{B} \cdot \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{bmatrix}$$

donde  $\tilde{C}$  está dada explícitamente por :

$$\tilde{C} = \begin{bmatrix} \gamma e^{ik} e^{-2ikN} & [M^2 \omega^2 - \gamma] \cdot e^{-2ikN} \\ [M_1 \omega^2 - 2\gamma] e^{ik} e^{-2ikN} & [1 + e^{2ik}] \gamma \cdot e^{-2ikN} \end{bmatrix}$$

Aplicando la relación (34), para encontrar la ecuación de eigenvalores , que nos determinará las frecuencias de los modos de superficie , y esto es - que el  $\det \|\tilde{C}\| = 0$  , tenemos :

$$[M_1 \omega^2 - 2\gamma] \cdot [M^2 \omega^2 - \gamma] - \gamma^2 [1 + e^{2ik}] = 0$$

La cual , es la misma ecuación de eigenvalores que obtuvieron Hori y Asahi <sup>(8)</sup> , en el mismo problema resuelto aplicando otro método .

**RESUMEN:** En este capítulo se ha mostrado a través de tres ejemplos de aplicación, la bondad que ofrece el método o técnica de la matriz  $C$  aplicada en obtener los modos localizados en redes unidimensionales con imperfecciones. En el primer ejemplo revisamos el problema de un cristal infinito con una imperfección, en este caso impureza, localizada en el centro, que ya había sido resuelto por Fukuda<sup>(7)</sup> aplicando la matriz de dispersión; en este primer caso vimos como aplicando este nuevo método, en una forma sencilla e inmediata, obtuvimos la misma ecuación de eigenvalores que la obtenida por Fukuda. El método de la matriz  $C$ , mostrado en el primer ejemplo, fue extendido para calcular las ecuaciones de eigenvalores con las que se obtienen las condiciones de existencia de los modos de superficie en dos problemas, resueltos en los ejemplos segundo y tercero, consistentes en: Una cadena unidimensional monoatómica con dos impurezas isotópicas en la superficie, y el de una cadena lineal diatómica con una impureza en la superficie, respectivamente. En estos dos últimos ejemplos se comparan las ecuaciones obtenidas, con las ecuaciones de eigenvalores obtenidas, para estos dos mismos problemas, por Hori y Asahi<sup>(8)</sup> aplicando otra técnica; llegando a una completa coincidencia de resultados.

CONCLUSIÓN:

## CONCLUSIÓN:

Dado el soporte matemático, desarrollado en el capítulo III, el cual sustenta al método de la matriz  $\mathcal{C}$ , este método resulta equivalente a la técnica de la matriz de dispersión en cuanto que, aplicada a problemas de vibraciones de redes lineales infinitos y semi-infinitas monoatómicas o diatómicas con y sin impurezas, obtiene la ecuación de eigenvalores para la existencia de los modos localizados. La ventaja sustancial es para el primer método debido a que a través de la relación (34), este resuelve los problemas en una forma sencilla y de manera inmediata. También esta fundamentación matemática permite que el método de la matriz  $\mathcal{C}$ , sea un método sencillo y confiable y que hace abrir expectativas de aplicación, a varios problemas en diferentes ra-

mas de la física. Sobre todo en aquellos en los que la construcción de la matriz de dispersión  $S$  resulta sumamente complicada. Es evidente que este nuevo método representa una alternativa, muy interesante, de aplicación en problemas de vibraciones de redes cristalinas.

Por otra parte, y sin perder de vista el desarrollo matemático previo, no es de sorprenderse que los resultados obtenidos en los diferentes problemas del presente trabajo, estén de acuerdo con los demás autores, como hemos señalado oportunamente. Cuando aparecen imperfecciones en los cristales, como es la presencia de átomos impureza, estos modifican las energías de los modos normales de vibración, haciendo que aparezcan nuevos estados de energía y diferentes amplitudes en los átomos impureza, localizando el modo vibracional, dependiendo de la masa de la impureza (ver problema del capítulo segundo). Los problemas tienen solución analítica.

Considero que la técnica o método de la matriz  $C$ , mostrado en este trabajo, constituye un tratamiento original en la Física de Superficies del Estado Sólido.

---

Referencias:

1. Saxon and Hutner, Some electronic properties of a dimensional Cristal Model, Phillips Research R. N.4 (1949).
2. Melvin Lax, Localized Perturbations, Letters to Editor (1954).
3. Montroll and Potts, Effect of defects on lattice vibrations, Physics Review, V.2, Oct. (1955).
4. Hori and Asahi, On the vibrations of disorder Lineal Lattice. Progr. Theo. Phys., v.17, N.4, Apr. (1957).
5. Mc. Kelvey, Solid State and Semiconductor Physics, H. and R.
6. Zemansky, Calor y Termodinámica, Aguilar.
7. Y. Fukuda, Vibrations of Linear Lattice Containing impurities, J. of the Phys. of Japan, v.17, N.5, May (1962).
8. Hori and Asahi, Scattering Matrix and surface Modes, Progr. Theo. Phys., v.13, N.1, Jan. (1964).
9. R.F. Wallis, Surfaces Effects on Lattice Vibrations, Surface Science, v.2, (1964).
10. Andrade y Saavedra, Frecuencias de Modos Localizados en Cadenas lineales infinitas con impurezas. Bol. Soc. Mex. de Fis. No.4, p.192 (1976).
11. Andrade y Zurita, Modos Localizados en Interface, Bol. Soc. Mex. de Fis. No.3, p.193, (1978).
12. Anton, Introducción al Algebra Lineal, Limusa.