

17  
2ej.



# UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

## FACULTAD DE CIENCIAS

ANALISIS DE UNA RED LINEAL MONOATOMICA  
INFINITA CON IMPUREZA AL CENTRO Y CONS-  
TANTES DE INTERACCION A PRIMEROS VECINOS  
DIFERENTES ATRAVES DE UN MODELO  
MATEMATICO

TESIS PROFESIONAL  
Que para obtener el Título de:  
M A T E M A T I C O  
p r e s e n t a  
ELISEO LANDA OROZCO



México, D. F. FACULTAD DE CIENCIAS  
SECCION ESCOLAR

1994

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN



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.

CIUDAD UNIVERSITARIA



UNIVERSIDAD NACIONAL  
AUTÓNOMA DE  
MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS  
División de Estudios  
Profesionales  
Exp. Núm. 55

M. EN C. VIRGINIA ABRIN BATULE  
Jefe de la División de Estudios Profesionales  
Universidad Nacional Autónoma de México.  
P r e s e n t e .

Por medio de la presente, nos permitimos informar a Usted, que habiendo  
revisado el trabajo de tesis que realiza el pasante ELISEO LANDA  
OROZCO.

con número de cuenta 3337114-6 con el título: "ANÁLISIS DE UNA  
RED LINEAL MONOTÓNICA INFINITA CON IMPUREZA AL CENTRO Y CONSTANTES DE INTERACCION  
A PRIMEROS VECINOS DIFERENTES, A TRAVÉS DE UN MODELO MATEMÁTICO".

Consideramos que reúne ~~los~~ los méritos necesarios para que pueda conti-  
nuar el trámite de su Examen Profesional para obtener el título de  
MATEMÁTICO.

GRADO NOMBRE Y APELLIDOS COMPLETOS

FIS. CARLOS HERNANDEZ SAAVEDRA

Director de Tesis

MAT. ASUNCIÓN PREISSER RODRÍGUEZ

ASESOR. M. EN C. OSCAR ALFREDO PALMAS VELASCO.

FIS. JUAN ANGELO GONZALEZ MENDOZA

Suplente

MAT. SMILTO CARRERA CASTRO

Suplente



FACULTAD DE CIENCIAS  
DIVISIÓN DE ESTUDIOS  
PROFESIONALES

FIRMA

Ciudad Universitaria, D.F., a 24 de junio de 1994

## DEDICATORIAS

A mis hijos:  
Ruth y Eliseo  
Qué al estudiar comprendan  
la realidad.

A mi esposa:  
Susy  
Por su amor y comprensión.

A mis padres:  
Lourdes y Eliseo  
Por su cariño y apoyo.

A mis hermanos:  
Carmen, Abigail, Hugo,  
Yazmin, Heidi y Job  
Por que siempre permanezcamos  
unidos.

A todos aquellos que hicieron  
posible la existencia de la  
Universidad Pública y gratuita.

## AGRADECIMIENTOS.

Deseo agradecer a los siguientes Profesores su participación en la revisión y comentarios -- del presente trabajo.

Director de Tesis.

FIS. CARLOS HERNANDEZ SAAVEDRA.

Asesor.

MAT. ASUNCION PREISSER RODRIGUEZ.

Sinodales.

M. EN C. OSCAR ALFREDO PALMAS VELASCO.

FIS. JUAN AMERICO GONZALEZ MENENDEZ.

MAT. EMILIO CABRERA CASTRO.

## INDICE

| DEDICATORIA     |   |      |
|-----------------|---|------|
| AGRADECIMIENTOS |   | PAG. |
| CAPITULO 1.     | INTRODUCCION -----  | 1    |
| CAPITULO 2.     | MODELO MATEMATICO Y APLICACIONES --   | 7    |
| 2.1.            | OSCILADOR ARMONICO. -----   | 7    |
| 2.1.1.          | OSCILADORES ACOPLADOS -----   | 13   |
| 2.2.            | VIBRACIONES EN UNA RED MONOATOMICA<br>INFINITA. -----   | 21   |
| 2.3.            | MATRIZ DE DISPERSION EN CADENAS --<br>LINEALES -----  | 23   |
| CAPITULO 3.     | TRANSFORMACIONES -  | 31   |
|                 | LINEALES Y MATRIZ C. -----  | 31   |
| 3.1.            | TRANSFORMACIONES LINEALES -----   | 31   |
| 3.1.1.          | ALGEBRA DE LAS TRANSFORMACIONES ---<br>LINEALES. -----  | 31   |
| 3.1.2.          | REPRESENTACION MATRICIAL DE TRANS--<br>FORMACIONES LINEALES. -----  | 33   |
| 3.2.            | LA MATRIZ C. -----  | 35   |
| CAPITULO 4.     | RED LINEAL MONOATOMICA INFINITA CON<br>IMPUREZA AL CENTRO Y CONSTANTES DE<br>INTERACCION A PRIMEROS VECINOS DIFE<br>RENTES ATRAVES DE LA MATRIZ C. ---- | 39   |
| 4.1.            | CALCULO DE LA RELACION DE DISPER--<br>SION DE MODOS LOCALIZADOS. -----  | 42   |
| 4.2.            | ANALISIS DE RESULTADOS. -----   | 45   |
|                 | CONCLUSION -----  | 50   |
|                 | REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS. -----   | 52   |

CAPITULO 1

INTRODUCCION

## C A P I T U L O 1

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

Una preocupación del hombre es explicarse su realidad. Los modelos matemáticos son una herramienta importante para este propósito. Un modelo matemático representa una abstracción de la realidad de la cual omitimos aspectos que no se consideran esenciales al problema objeto de estudio. Para esto es necesario desarrollar un lenguaje simbólico, que permita la comprensión y manipulación de los diversos componentes del problema.

Una vez que se obtienen resultados o conclusiones, del modelo abstracto, se tratan de adecuar estos a la realidad.

El presente trabajo es un modelo matemático a un problema de física del estado sólido. A saber, describir el movimiento de los átomos en un cristal.

Manejando el 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 son:

1) Ninguno de los átomos del sólido se desplaza de su posición de equilibrio una distancia mas allá, de don de sea valida la ley de Hooke.

2) El movimiento de los átomos está limitado a una dimensión, de tal manera 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 es proporcional al desplazamiento  $x$  desde el origen según la ley de Hooke  $F = -\lambda x$ .

Un sólido en el cual todos sus átomos son idénticos se le conoce como cristal puro o cristal perfecto, en caso contrario cristal con impurezas.

Existen antecedentes al presente estudio. 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 fué, haber encontrado que algunos modos normales de vibración tienen frecuencia fuera de la banda permitida, este resultado se observó experimentalmente hasta 1958. Es decir una impureza en un cristal es causa del cambio en los modos normales de vibración del cristal puro, teniendo como resultado modos normales de vibración con frecuencias por encima de la banda permitida, es decir en la banda prohibida a los que se le 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.

Existen varios métodos para abordar problemas de modos localizados, entre ellos están, la función de Green, la matriz de dispersión, el método de la onda reflejada, y la matriz de transferencia.

El método de la matriz de dispersión fue introducido en 1949 por Saxon y Huther (1) para resolver el problema de una red cristalina monoatómica unidimensional. En 1953 Slater trata el problema de una impureza empleando las ecuaciones de diferencias. En 1954 Melvin Lax y Smith (2) tratan el problema de perturbaciones localizadas por medio de matrices. Montroll y Potts en 1955 (3) resuelven el problema de los defectos y sus efectos usando el método de la función de Green. En 1957 Hori y Asahi (4) tratan las vibraciones desordenadas de una red lineal con el método de la matriz de transferencia, este método también es usado en 1962 por Fukuda (5), junto con el método de la matriz de dispersión, para resolver el problema, de una red monoatómica infinita con una impureza al centro en este trabajo demuestra que ambos métodos son equivalentes. En 1964 Hori y Asahi (6) usan la matriz de dispersión para resolver el problema de modos de superficie cuyos efectos también son estudiados por Wallis (7) en el mismo año. Andrade y Saavedra en 1975 (8) usando la matriz de dispersión analizan el efecto de una impureza sobre las frecuencias 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 constantes de interacción de este átomo con sus vecinos mas cercanos.

El presente trabajo, utiliza un nuevo método para el tratamiento de los modos localizados y de superficie llamado la técnica de la matriz C, método propuesto por Saavedra, en 1992.(14)

Analizaremos una red lineal monoatómica infinita con impureza al centro y constantes de interacción a pri

meros vecinos diferentes através de la matriz  $C$ . Compararemos los resultados con los ya obtenidos.

En el capítulo 2, presentamos el modelo matemático del oscilador armónico, así como las nociones de la física necesarias. Resolvemos el problema de una red monoatómica infinita perfecta, así como con una impureza al centro sin cambiar la constante de interacción a primeros vecinos, utilizando la matriz de dispersión.

En el capítulo 3, definimos la matriz  $C$ , demostrando su equivalencia con el método de la matriz de dispersión. A través de la equivalencia entre sus singularidades, para lo cual recordamos nociones básicas, así como teoremas importantes del álgebra lineal, que justifican el aspecto matemático de la matriz  $C$ .

En el capítulo 4 resolvemos el problema de una red lineal monoatómica infinita con impureza al centro y --- constantes de interacción a primeros vecinos diferentes através de la matriz  $C$ . Calculamos la relación de dispersión y analizamos resultados.

Concluimos mostrando las ventajas de la técnica de la matriz  $C$ , indicando que puede ser útil en problemas de superficie u otros de la física.

CAPITULO 2

MODELO MATEMATICO  
Y  
APLICACIONES

## CAPITULO 2

### 2 MODELO MATEMATICO Y APLICACIONES.

El presente capítulo lo dedicaremos inicialmente al estudio del modelo clásico del oscilador armónico simple debido a que dicho sistema representa muy adecuadamente el movimiento oscilatorio que presentan las moléculas y átomos de un sólido que vibran armónicamente respecto de sus posiciones de equilibrio. Posteriormente consideraremos las vibraciones de una red lineal monoatómica infinita, pensando al átomo como un todo analizaremos el desplazamiento de su posición de equilibrio según el modelo armónico. Y finalmente a través de la matriz de dispersión calcularemos la relación de dispersión de modos localizados en una red lineal monoatómica infinita con impureza al centro y constantes de interacción a primeros vecinos igual.

#### 2.1. OSCILADOR ARMONICO.

Es posible predecir el movimiento de un cuerpo si se conocen las fuerzas externas que actúan sobre él se presenta un tipo especial de movimiento cuando la fuerza sobre un cuerpo es proporcional al desplazamiento del mismo, desde la posición de equilibrio.

Si esta fuerza siempre actúa hacia la posición de equilibrio del cuerpo se producirá un movimiento hacia uno y otro lados de esta posición, a un movimiento de este tipo se llama periódico u oscilatorio. <sup>(11)</sup>

Se dice que una partícula en movimiento a lo largo del eje  $x$ , tiene un movimiento armónico simple, cuando su desplazamiento respecto al equilibrio  $x$ , varía con el tiempo según la relación.

$$X(t) = A e^{j(\omega t + \delta)} \quad (1)$$

En donde  $A$ ,  $\omega$  y  $\delta$  son constantes del movimiento. Para dar significado físico a estas constantes conviene trazar la gráfica de  $x(t)$ , (Parte real)

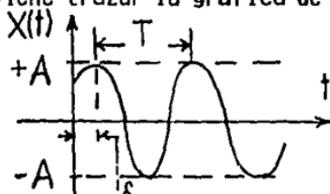


FIG.(1)

Observe que  $A$  conocida como amplitud de movimiento es el desplazamiento máximo de la partícula. El tiempo que tarda la partícula en recorrer un ciclo completo de su movimiento se llama período  $T$ . Es decir, el valor de  $x$  en el instante  $t$  es igual al valor de  $x$  en el instante  $t + T$ .

El recíproco del período se llama frecuencia del movimiento,  $f$  la frecuencia representa el número de oscilaciones que realiza la partícula por unidad de tiempo.

$$f = \frac{1}{T} \quad (2)$$

Las unidades de  $f$  son ciclos/segundo

La constante  $\omega$  se llama frecuencia angular, se define como:

$$\omega = 2\pi f = \frac{2\pi}{T} \quad (3)$$

Las unidades  $\omega$  son radianes/segundo

El ángulo  $\delta$  es la constante de fase (o ángulo de fase) y junto con la amplitud  $A$  queda determinado de manera única por el desplazamiento y la velocidad inicial de la partícula. La constante  $\delta$  da a conocer cuál fue el desplazamiento en el instante  $t=0$ . La cantidad  $\omega t + \delta$  se conoce como fase del movimiento, es útil al comparar los movimientos de dos sistemas de partículas obsérvese que la función  $x(t)$  es periódica y se repite cuando  $\omega t$  aumenta en  $2\pi$  radianes.

Se obtiene la velocidad de una partícula que efectúa un movimiento armónico simple si se deriva (1) respecto al tiempo.

$$v(t) = \frac{dx}{dt} = A\omega e^{i(\omega t + \delta)} \quad (4)$$

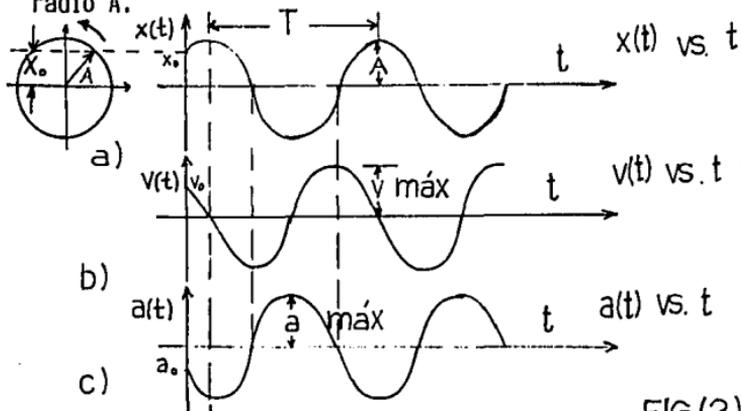
La aceleración de la partícula está dada por:

$$a(t) = \frac{dv}{dt} = -A\omega^2 e^{i(\omega t + \delta)} \quad (5)$$

Como las funciones seno y coseno oscilan entre  $\pm 1$  los valores extremos de  $v(t)$  son iguales a  $\pm A\omega$  y los valores extremos de la aceleración son  $\pm A\omega^2$

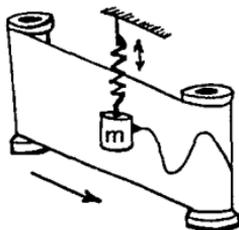
La siguiente figura representa al desplazamiento contra el tiempo, para un valor arbitrario de la constante de fase. La proyección de un punto que se mueve con -

movimiento circular uniforme sobre una circunferencia de radio  $A$ .



FIG(2).

Observe que la velocidad esta fuera de fase  $90^\circ$  respecto al desplazamiento y la aceleración está  $180^\circ$  fuera de fase respecto al mismo desplazamiento. Es decir cuando  $x$  es máximo o mínimo, la velocidad es cero. Del mismo modo cuando  $x$  es cero la rapidez es máxima. Y cuando  $x$  es máximo  $a$  es mínima y viceversa.



FIG(3).

Aparato experimental para demostrar el movimiento armónico simple. La plumilla sujeta a una masa oscilante traza una onda senoidal sobre el papel que esta en movimiento.

Consideremos el sistema físico que consta de una masa sujeta al extremo de un resorte, en donde la masa puede moverse sobre una superficie horizontal y sin fricción, oscilara hacia uno y otro lado si se le perturba respecto a la posición de equilibrio  $x=0$  en donde el resorte está sin deformación alguna adquiriendo la masa un movimiento armónico simple.

Note que cuando la masa se desplaza una pequeña distancia  $x$  respecto al equilibrio, el resorte ejerce una fuerza  $F$  dada por la ley de Hooke.

$$F = -\lambda x \quad (6)$$

En donde  $\lambda$  es la constante de fuerza del resorte, A tal fuerza se le conoce como fuerza lineal de restitución, ya que es linealmente proporcional al desplazamiento y siempre está dirigida a la posición de equilibrio, opuesta a este desplazamiento. Es decir cuando la masa se desplaza hacia la derecha,  $x$  es positiva y la fuerza de restitución está dirigida hacia la izquierda. Si la masa se desplaza hacia la izquierda de  $x=0$ , entonces  $x$  es negativa y  $F$  está dirigida hacia la derecha. Aplicando la segunda ley de Newton al movimiento de  $m$  con dirección  $x$  se obtiene:

$$F = -\lambda x = ma \quad (7)$$

luego  $a = \frac{-\lambda x}{m} \quad (8)$

Es decir, la aceleración es proporcional al desplazamiento de la masa respecto a la posición de equilibrio y esta dirigida en la dirección opuesta. Si la masa se desplaza una distancia máxima  $x=A$ , en algún instante

inicial y se libera a partir del reposo su aceleración inicial será  $-\frac{\lambda A}{m}$  (es decir tiene un valor negativo máximo). Al pasar por la posición de equilibrio  $x=0$  su aceleración es cero en ese instante su velocidad es máxima; después se movera hacia la izquierda del equilibrio y finalmente llegara a  $x=-A$ , en cuyo instante su aceleración es  $\frac{\lambda A}{m}$  (positiva máxima) y una vez mas su velocidad es cero. Por tanto se ve que la masa oscilará entre los puntos  $\pm A$ . En un ciclo completo de su movimiento la masa recorre una distancia de  $4A$ . Dado que la aceleración es la segunda derivada del desplazamiento respecto al tiempo, si denotamos  $\frac{\lambda}{m}$  como  $\omega^2$  la ecuación (8) se reescribe

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -\omega^2 x \quad (9)$$

La solución a esta ecuación diferencial esta dada por (1).

De la definición de frecuencia angular se tiene  $T = \frac{2\pi}{\omega}$  y la frecuencia es el recíproco del período, luego estas se pueden expresar como:

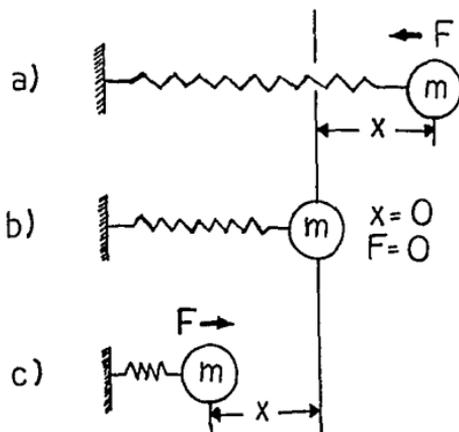
$$T = \frac{2\pi}{\omega} = 2\pi \sqrt{\frac{m}{\lambda}} \quad (10)$$

$$f = \frac{1}{T} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\lambda}{m}} \quad (11)$$

Período y frecuencia del sistema masa-resorte.

Es decir el período y la frecuencia dependen únicamente de la constante de fuerza del resorte y de la masa. Como era de esperarse la frecuencia es mayor si el resorte es mas rígido y disminuye al aumentar la masa.

Masa sujeta a un resorte sobre una superficie sin fricción, exhibe movimiento armónico simple.



FIG(4)

a) Cuando la masa se desplaza hacia la derecha -- del punto de equilibrio, el desplazamiento es positivo y la aceleración negativa.

b) En la posición de equilibrio  $x=0$ , la aceleración es cero pero la rapidez es máxima.

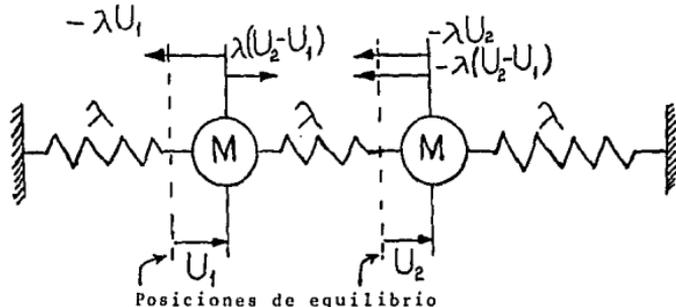
c) Cuando el desplazamiento es negativo, la aceleración es positiva.

### 2.1.1. OSCILADORES ACOPLADOS.

Consideremos ahora el caso de dos masas  $M$  iguales unidas por tres resortes con extremos fijos, esta situación se conoce como osciladores acoplados.

En la siguiente figura se tienen dos masas iguales  $M$  y tres resortes con extremos fijos, supondremos que las constantes de restitución  $\lambda$  de los resortes son iguales,

$U_1, U_2$ , denotaran los desplazamientos de las masas a partir de su posición de equilibrio. (Medidos como positivos cuando están a la derecha.)



FIG(4.1)

El resorte de la izquierda ejerce una fuerza  $-\lambda U_1$  sobre la primera masa, y similarmente el resorte de la derecha ejerce una fuerza  $-\lambda U_2$  sobre la segunda masa. El resorte central ha sufrido una elongación  $U_2 - U_1$  y por tanto las fuerzas que ejerce sobre cada partícula cuando trata de recobrar su longitud original son  $\lambda(U_2 - U_1)$  sobre la primera masa y  $-\lambda(U_2 - U_1)$  sobre la segunda masa.

Entonces la ecuación de movimiento de cada partícula es:

$$M \frac{d^2 U_1}{dt^2} = -\lambda U_1 + \lambda(U_2 - U_1) \quad (11.1)$$

$$M \frac{d^2 U_2}{dt^2} = -\lambda U_2 - \lambda(U_2 - U_1) \quad (11.2)$$

El movimiento general de dos osciladores acoplados descrito en las anteriores ecuaciones puede considerarse como la superposición de dos modos normales de vibración.

En uno de los modos normales, los dos osciladores se mueven en fase, con amplitudes iguales, esto es:

$$U_1 = A \operatorname{sen}(w_1 t + \delta) \quad (11.3)$$

$$U_2 = A \operatorname{sen}(w_1 t + \delta)$$

$$w_1 = \sqrt{\frac{\lambda}{M}}$$

Es decir la frecuencia de los osciladores acoplados es la misma frecuencia de oscilación que cada masa tendría si no hubiera acoplamiento.

Esto es fácilmente comprensible porque, como los osciladores tienen igual amplitud y están en fase el resorte central no sufre ningún estiramiento y por tanto no --- ejerce ninguna fuerza sobre las masas, las cuales se mueven como si no estuvieran acopladas.

En el segundo modo normal, los dos osciladores se mueven en oposición con amplitudes iguales, esto es:

$$U_1 = A \operatorname{sen}(w_2 t + \delta) \quad (11.4)$$

$$U_2 = -A \operatorname{sen}(w_2 t + \delta)$$

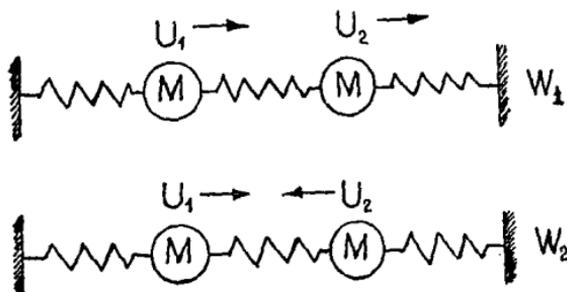
$$w_2 = \sqrt{\frac{3\lambda}{M}}$$

Entonces la frecuencia es mayor que la frecuencia sin acoplamiento. Esto debido a que ahora el resorte central se estira y se comprime, esto equivale a aumentar la

constante de restitución de cada oscilador.

Los modos normales, corresponden a una situación en la cual las dos masas se mueven con diferencia de fase constante, la cual es cero en el primero y  $\pi$  en el segundo. Las dos masas pasan simultáneamente a través de su posición de equilibrio y alcanzan sus desplazamientos máximos simultáneamente.

La siguiente figura muestra los dos modos normales de oscilación.



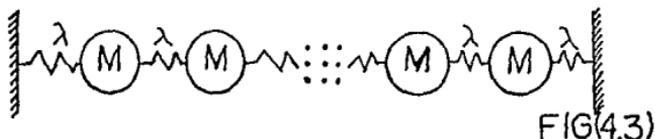
FIG(4,2)

La solución general de las ecuaciones de movimiento son una combinación lineal de los modos normales de oscilación, esto es:

$$U_1 = A \operatorname{sen}(w_1 t + \delta) + A \operatorname{sen}(w_2 t + \delta) \quad (11.5)$$

$$U_2 = A \operatorname{sen}(w_1 t + \delta) - A \operatorname{sen}(w_2 t + \delta)$$

Consideremos ahora el caso de N-masas iguales M, unidas por resortes con extremos fijos y constantes de interacción  $\lambda$  iguales como lo indica la siguiente figura. (Se recomienda ver video (15) donde se analiza experimentalmente el caso N=5).



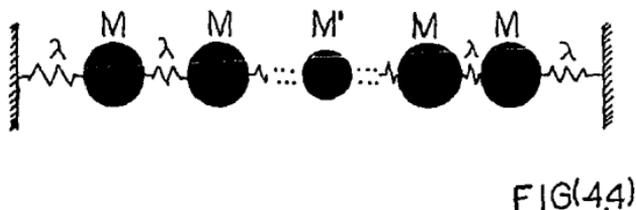
En este caso se tienen N-modos normales de vibración, los cuales están dados en términos de la frecuencia angular por la fórmula:

$$W_r = \sqrt{\frac{2\lambda}{M}} \sin\left(r\pi/2(N+1)\right) \quad (11.6)$$

$$(r=1,2,3,\dots,N).$$

Para una deducción de la anterior fórmula véase (16). En el caso de una red finita con extremos fijos de N-1 -- masas iguales y una masa diferente, con constantes de interacción  $\lambda$  iguales como lo indica la siguiente figura,

$$M' \neq M$$

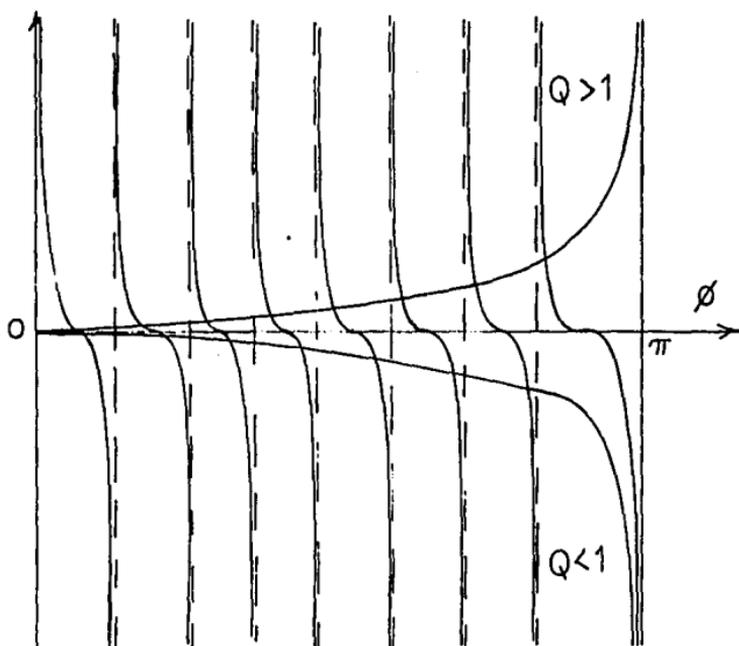


Deben esperarse N-modos normales de vibración .  
 Si  $Q = \frac{M'}{M}$  y  $0 < Q < 1$ . De estos N-modos normales de - -  
 vibración N-1 están dados por las raíces de la si-  
 guiente ecuación, en el intervalo  $0 < \phi < \pi$  (véase (16))

$$\cot p\phi + \cot(N-p+1)\phi = 2(Q-1)\tan\frac{\phi}{2} \quad (11.7)$$

Donde p indica el lugar de la masa diferente o de la "impureza" y  $1 \leq p \leq N$ .

La siguiente figura representa geoméricamente la solución de la ecuación (11.7) Para  $N=8$  y  $p=4$ .



FIG(4.5)

Observe en la fig. (4,5) el lado derecho de la ecuación (11.7) es creciente si  $Q > 1$  y decreciente si  $0 < Q < 1$ , y - ambos tienen asíntota vertical  $\theta = \pi$ .

Cuando  $Q > 1$  las gráficas se cruzan en cada una de las ocho regiones en las cuales es dividido el intervalo  $0 < \theta < \pi$  por asíntotas verticales.

Cuando  $0 < Q < 1$ , en la última subdivisión del intervalo  $0 < \theta < \pi$  las gráficas no se cruzan, y entonces ocurre que "falta" un modo de vibración. Este se conoce como modo localizado y "ocurre" con una frecuencia arbitrariamente grande o infinita. Pero las frecuencias para  $\theta$  reales están acotadas por  $\sqrt{\frac{2\lambda}{M}}$  (véase fig. (6)). Se prueba (16) que un modo

localizado fuera de la banda  $\left[0, \sqrt{\frac{2\lambda}{M}}\right]$  se satisface para un

$\theta$  complejo. Si  $\theta = \pi + i\eta$  la raíz de la ecuación:

( $\eta$  real)

$$\sinh \frac{\eta}{2} \sinh(N+1)\eta = 2(1-Q) \cosh \frac{\eta}{2} \quad (11.8)$$

$$X \sinh(N-p+1)\eta \sinh p\eta$$

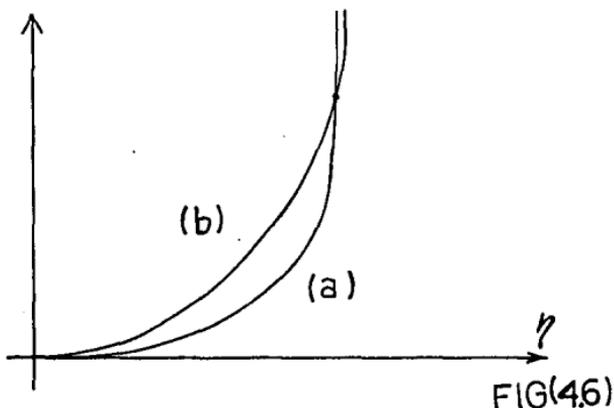
Determina el modo localizado.

Para  $\eta > 1$  los dos miembros de la ecuación (11.8) están dados por:

a)  $(1/4) \exp((N+3/2)\eta)$  ( $izq$ ). (11.9)

b)  $(1/4)(1-Q) \exp((N+3/2)\eta)$  ( $der$ ).

La siguiente figura ilustra geoméricamente los dos --- miembros de la ecuación (11.8) cuando  $0 < Q < 1$ .



Observe que la ecuación (11.8) tiene una única solución ya que gráficamente solo hay un cruce, según fig. (4.6). Así las cosas la solución del modo localizado junto con los  $N-1$  modos normales de vibración dados por la ecuación (11.7), resuelven el problema de modos de vibración para una red finita con una impureza, constantes de interacción  $\lambda$  iguales, y extremos fijos.

El estudio de las redes lineales finitas no es propiamente la preocupación del presente trabajo. (Para ello véase (16)). Sin embargo su presentación permite partir de un modelo macroscópico y utilizar éste en el análisis de una red lineal monoatómica infinita con impureza al centro y constantes de interacción a primeros vecinos diferentes a través de un modelo matemático. Lo cual proporciona una aproximación a la explicación microscópica de la materia.

En la siguiente sección, estudiaremos una cadena lineal monoatómica infinita y deduciremos su ecuación que proporciona los infinitos modos normales de vibración,----- como era de esperarse la ecuación de N-modos normales es - un caso particular de ésta.

## 2.2. VIBRACIONES EN UNA RED MONOATOMICA INFINITA.

Los átomos de un sólido vibran constantemente alrededor de sus posiciones de equilibrio. <sup>(12)</sup> Consideraremos una red lineal monoatómica infinita y calcularemos sus modos normales de vibración con una teoría armónica.

Sea una fila de átomos idénticos con interespacia do  $h$ . Sin pérdida de generalidad podemos considerar  $h=1$ .

Supondremos que los átomos se desplazan de sus posiciones de equilibrio como un todo, es decir arrastrando en su movimiento a los electrones.

La siguiente figura representa una red lineal perfecta monoatómica infinita, con constante de interacción  $\lambda$  a primeros vecinos igual.

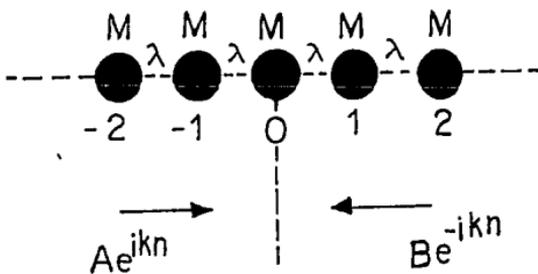


FIG.(5)

Si  $U_n$  es el desplazamiento del n-ésimo átomo respecto de su posición de equilibrio, la ecuación de movimiento considerando a sus primeros vecinos se escribe.

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

O bien:

$$M \frac{d^2 U_n}{dt^2} = -\lambda(U_{n+1} + U_{n-1} - 2U_n) \quad (13)$$

La solución la expresaremos en términos de combinación lineal de ondas planas, ondas incidentes y ondas -- que se dispersan.

$$U_n = A e^{i k n} + B e^{-i k n} \quad (14)$$

( $k = 2\pi / \text{longitud de onda.}$ )

K representa el número de onda.

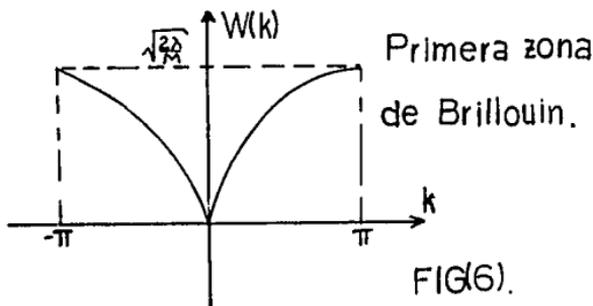
Sustituyendo (14) en (13) se obtiene:

$$(A e^{i k n} + B e^{-i k n})(M \omega^2 + 2\lambda \cos k - 2\lambda) = 0 \quad (15)$$

$$Mw^2 + 2\lambda(\cos k - 1) = 0 \quad (16)$$

$$W^2 = \frac{2\lambda}{M}(1 - \cos k) \quad (17)$$

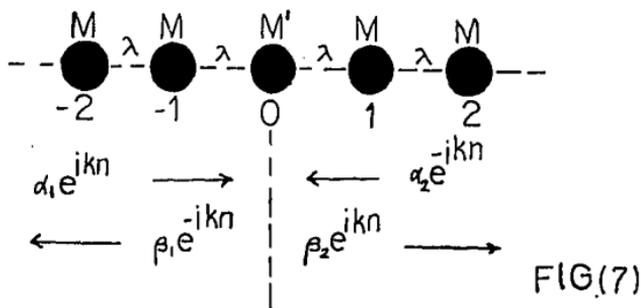
$$W = \sqrt{\frac{2\lambda}{M}} \left| \sin \frac{k}{2} \right| \quad (18)$$



Hemos encontrado que las soluciones de las ecuaciones de movimiento para los átomos de una cadena lineal en aproximación armónica vienen dadas por la ecuación (14) estas soluciones dependen de  $W$ , que se expresa en función de  $k$ , o en la aproximación de interacción entre vecinos más próximos mediante la ecuación (18). La ecuación (17) se conoce como relación de dispersión y señala los modos normales de vibración.

### 2.3. MATRIZ DE DISPERSION EN CADENAS LINEALES.

La siguiente figura representa una red lineal monoatómica infinita, con impureza al centro y constante de interacción a primeros vecinos igual.<sup>(5)</sup>



Supondremos el parámetro de la red unitario, y sea  $U_n$  el desplazamiento del  $n$ -ésimo átomo de su posición de equilibrio  $\lambda$  la constante de fuerza,  $M$  y  $M'$  son las masas de los átomos regular y de impureza respectivamente. Así, las ecuaciones de movimiento a primeros vecinos están dadas por (la primera ecuación es la misma que la ecuación de movimiento de la red perfecta)

$$Mw^2 U_n + \lambda (U_{n+1} + U_{n-1} - 2U_n) = 0 \quad n \neq 0 \quad (19.a)$$

$$M'w^2 U_0 + \lambda (U_1 + U_{-1} - 2U_0) = 0 \quad n = 0 \quad (19.b)$$

La solución se expresa en términos de combinación lineal de ondas planas como:

$$U_n = \alpha_1 e^{ikn} + \beta_1 e^{-ikn} \quad n \leq 0 \quad (20.a)$$

$$U_n = \alpha_2 e^{-ikn} + \beta_2 e^{ikn} \quad n \geq 0 \quad (20.b)$$

La solución debe ser continua en  $n=0$ . luego de -- (20.a) y (20.b) se tiene:

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

Sustituyendo la solución  $U_0, U_{-1}, U_1$ , respectivamente en (19.b).

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

Así tenemos dos ecuaciones (21) y (22) con cuatro incógnitas  $\alpha_1, \alpha_2, \beta_1, \beta_2$ , por lo que podemos expresar dos de ellas en términos de las otras dos. En particular  $\beta_1$  y  $\beta_2$  en términos de  $\alpha_1$  y  $\alpha_2$  en la forma matricial.

$$\begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} \quad (23)$$

Por ser  $\beta_1 e^{-ik}, \beta_2 e^{ik}$  las ondas que se dispersan se conoce a la matriz  $S$  como matriz de dispersión.

Hallemos los coeficientes de la matriz  $S$ .

De la ecuación de continuidad (21) se tiene, --  $\beta_1 = -\alpha_1 + \alpha_2 + \beta_2$  sustituyendo en (22) y despejando  $\beta_2$  se obtiene:

$$\beta_2 = S_{21} \alpha_1 + S_{22} \alpha_2$$

$$S_{21} = \frac{2\lambda i \sin k}{M\omega^2 + 2\lambda(e^{ik} - 1)} \quad S_{22} = \frac{-M\omega^2 - 2\lambda \cos k + 2\lambda}{M\omega^2 + 2\lambda(e^{ik} - 1)}$$

Ahora sustituyendo  $\beta_2 = -\alpha_2 + \alpha_1 + \beta_1$  en (22) y despejando  $\beta_1$  se obtiene:

$$\beta_1 = S_{11} \alpha_1 + S_{12} \alpha_2$$

Donde:

$$S_{11} = \frac{-M\omega^2 - 2\lambda \cos k + 2\lambda}{M\omega^2 + 2\lambda(e^{ik} - 1)} \quad S_{12} = \frac{2\lambda i \sin k}{M\omega^2 + 2\lambda(e^{ik} - 1)}$$

Hay una teoría general (17) que dice que un modo localizado existira para aquella energía para la cual la amplitud de dispersión se hace infinita si se extrapola algebraicamente a las regiones fuera de la banda permitida.

La razón física de esto es la siguiente:

Un modo localizado es una situación en la cual hay solamente ondas atadas a un punto y no hay ninguna onda que haya llegado para generarla, y simplemente existe allí por sí misma.

La proporción relativa entre la onda llamada "dispersada" o creada y la onda que ha sido "enviada" allí es infinita.

Aplicando esta idea se tiene que la ecuación:

$$\begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} \quad (23)$$

De acuerdo con nuestro razonamiento se debería utilizar solamente para frecuencias en la banda permitida  $\left[0, \sqrt{\frac{2\lambda}{M}}\right]$ .

Sin embargo si se extiende a regiones "no-físicas", entonces debemos preguntarnos bajo que condiciones cada elemento de la matriz S es infinita. (Esto es cuando S tiene un polo).

Esto nos da una frecuencia por encima de la banda permitida. Y allí existe un modo localizado o un modo de vibración que se nos "escapa".

La situación física descrita anteriormente se conoce como estado estacionario sin ondas incidentes. Esta condición en términos de la matriz de dispersión se traduce a:

$$M'w^2 + 2\lambda(e^{ik} - 1) = 0 \quad (24)$$

Esta ecuación es útil para obtener solo modos localizados.

Se sabe  $w^2 = \frac{2\lambda}{M} (1 - \cos k)$  sustituyendo en (24) se obtiene:

$$\frac{M'}{M} (1 - \cos k) + e^{ik} - 1 = 0 \quad (25)$$

Haciendo  $k = \pi + i\theta$  y  $Q = \frac{M'}{M}$  en (25)

$$Qe^{2\theta} + 2(Q-1)e^{\theta} + Q - 2 = 0 \quad (26)$$

Resolviendo según la fórmula general obtenemos las soluciones:

$$e^{\theta}_1 = -1 \quad e^{\theta}_2 = \frac{2-Q}{Q} \quad (27)$$

consideramos sólo  $e^{\theta}_2$ .

Note que  $0 < Q < 1$  Cuando  $M' < M$  (i.e.  $Q < 1$ ) la ecuación (27) se satisface para un valor real de  $\theta$ . Esta frecuencia es mayor que cualquier frecuencia en la banda continua.

Ahora como  $e^{ik} = -e^{-\theta}$  sustituyendo esto en (25) se tiene:

$$\frac{M'}{M} (1 - \cos K) - e^{-\theta} - 1 = 0 \quad (28)$$

pero  $1 - \cos K = \frac{M^2 M}{2\lambda}$  por lo que se sigue

$$1 - \frac{M^2 M}{2\lambda} + e^{-\theta} = 0 \quad (29)$$

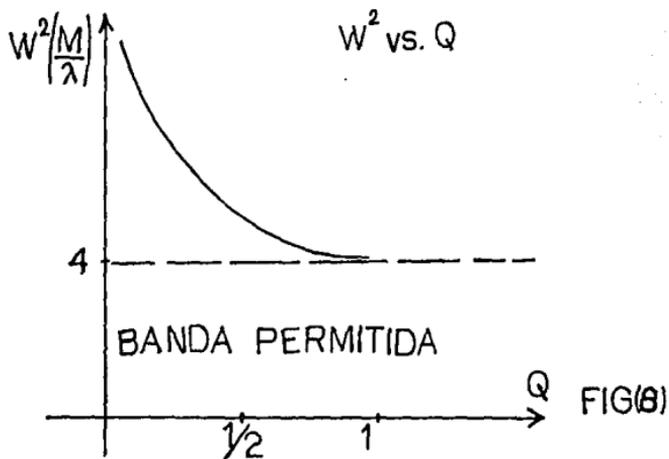
Así, la ecuación de frecuencia de los modos localizados se escribe:

$$M^2 \left( \frac{M}{\lambda} \right) = \frac{2}{Q} (1 + e^{-\theta}) \quad (30)$$

como

$$\lim_{Q \rightarrow 1} \frac{2}{Q} (1 + e^{-\theta}) = \lim_{Q \rightarrow 1} \frac{2}{Q} \left( 1 + \frac{Q}{2-Q} \right) = 4$$

se obtiene la siguiente gráfica.



Este resultado fue obtenido por Fukuda<sup>(5)</sup>, en donde se localiza un modo de vibración por encima de la banda permitida al cual se le conoce como -- modo localizado.

CAPITULO 3

TRANSFORMACIONES  
LINEALES Y MATRIZ

C.

## CAPITULO 3

### 3. TRANSFORMACIONES LINEALES Y MATRIZ C.

#### 3.1. TRANSFORMACIONES LINEALES.

Ahora presentaremos el aspecto matemático de nuestro estudio para poder aplicar la técnica de la matriz C en problemas de redes lineales con impurezas, recordaremos el álgebra de las transformaciones lineales, así como su representación matricial. Señalaremos teoremas importantes del álgebra lineal, que justifican el uso de la matriz C, la cuál se define en la sección 3.2.

##### 3.1.1. ALGEBRA DE LAS TRANSFORMACIONES LINEALES.

Definición: Sean V, W espacios vectoriales sobre un campo F. Una transformación lineal de V en W, es una función T de V en W tal que:

$$T(c\alpha + \beta) = cT(\alpha) + T(\beta) \quad \forall \alpha, \beta \in V, c \in F.$$

### Teorema (1)

Sean  $V$  y  $W$  espacios vectoriales sobre un campo  $F$  y sea  $T$  una transformación lineal de  $V$  en  $W$ . Si  $T$  es uno a uno y sobre entonces la función inversa  $T^{-1}$  es una transformación lineal de  $W$  en  $V$ .

### Demostración:

Sean  $\beta_1, \beta_2 \in W$  y  $c \in F$  sea  $\alpha_1 = T^{-1}(\beta_1)$ ,  $\alpha_2 = T^{-1}(\beta_2)$ ,  $\alpha_i$   $i=1,2$ . es el único vector en  $V$  tal que  $T(\alpha_i) = \beta_i$ . Como  $T$  es lineal  $T(c\alpha_1 + \alpha_2) = cT(\alpha_1) + T(\alpha_2) = c\beta_1 + \beta_2$  luego  $c\alpha_1 + \alpha_2$  es el único en  $V$  tal que  $T^{-1}(c\beta_1 + \beta_2) = c\alpha_1 + \alpha_2 = cT^{-1}(\beta_1) + T^{-1}(\beta_2)$  luego  $T^{-1}$  es una transformación lineal.

### Teorema (2)

Sean  $V$ ,  $W$  y  $Z$  espacios vectoriales sobre un campo  $F$ . Sea  $T$  una transformación lineal de  $V$  en  $W$  y  $U$  una transformación lineal de  $W$  en  $Z$ . Entonces la función - composición definida como  $(U \cdot T)(\alpha) = U(T(\alpha))$  es una transformación lineal de  $V$  en  $Z$ .

### Demostración:

$$\begin{aligned}(U \cdot T)(c\alpha + \beta) &= U(T(c\alpha + \beta)) \\ &= U(cT(\alpha) + T(\beta)) \\ &= cU(T(\alpha)) + U(T(\beta)) \\ &= c(U \cdot T)(\alpha) + (U \cdot T)(\beta)\end{aligned}$$

### Teorema (3)

Sean  $V$  un espacio vectorial sobre un campo  $F$  y sean  $U, T$ . Transformaciones lineales invertibles sobre  $V$ . Entonces  $U \cdot T$  es invertible y  $(U \cdot T)^{-1} = T^{-1} \cdot U^{-1}$

### Demostración:

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

Y como la función Inversa es única se sigue el resultado.

### 3.1.2. REPRESENTACION MATRICIAL DE TRANSFORMACIONES LINEALES.

Definición: Sea  $V$  un espacio vectorial, una base para  $V$  es un conjunto de vectores linealmente independientes en  $V$ , el cual genera  $V$ .

Considérese ahora  $V$  un espacio vectorial  $n$ -dimensional sobre un campo  $F$  y sea  $W$  un espacio vectorial  $m$ -dimensional, con  $B_1 = \{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n\}$ ,  $B_2 = \{\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_m\}$  bases para  $V$  y  $W$  respectivamente. Si  $T$  es una transformación lineal de  $V$  en  $W$  entonces  $T$  está determinada por su aplicación sobre los vectores  $\alpha_j$  cada uno de los  $n$ -vectores  $T(\alpha_j)$  se puede expresar de manera única como una combinación lineal de los  $\beta_i$  los escalares  $A_{1j}, A_{2j}, \dots, A_{mj}$  son las coordenadas de  $T(\alpha_j)$  en la base  $B_2$ , luego la transformación  $T$  está determinada por los  $mn$  escalares  $A_{ij}$ . La  $m \times n$  matriz  $A$  definida por  $A(i, j) = A_{ij}$  es llamada la matriz de  $T$  relativa al par de bases  $B_1, B_2$ .

La correspondencia  $T \rightarrow A$  es uno a uno entre el conjunto de todas las transformaciones lineales de  $V$  en  $W$  y el conjunto de todas las matrices  $m \times n$  sobre el campo  $F$ .

Teorema (4) Sean  $V, W$  y  $Z$  espacios vectoriales de dimensión finita sobre un campo  $F$ , sea  $T$  una transformación lineal de  $V$  en  $W$  y  $U$  una transformación lineal de  $W$  en  $Z$ . Si  $B_1, B_2, B_3$  son bases para los espacios  $V, W$  y  $Z$  respectivamente,  $A$  es la matriz de  $T$  relativa al par  $B_1, B_2$ , y  $B$  es -

la matriz de U relativa T relativa al par  $B_2, B_3$ , -  
entonces la matriz de la composición  $U \circ T$  relativa  
al par  $B_1, B_3$ , es la matriz producto:

$$H = BA$$

Demostración:

$$\text{Sea } \alpha \in V, T(\alpha) = A(\alpha)$$

$$U(T(\alpha)) = B(T(\alpha))$$

$(U \circ T)(\alpha) = BA(\alpha)$  luego de la -  
definición y unicidad de la matriz asociada se si--  
gue que  $H=BA$ .

Corolario. Una transformación lineal es inver-  
tible si y sólo si la matriz asociada lo es.

Definición: Sea  $A, B$  matrices  $n \times n$  sobre un campo  
 $F$ . Decimos que  $B$  es similar a  $A$  si existe una ma--  
triz invertible  $n \times n$   $P$  sobre el campo  $F$  tal que:

$$B = P^{-1}AP$$

Dada una transformación lineal  $T$  su matriz aso-  
ciada  $A$  es única excepto por similaridad.

Decimos que una matriz  $A$  es invertible si exis-  
te una matriz  $A^{-1}$  tal que:

$$A^{-1}A = AA^{-1} = \text{Identidad.}$$

Teorema (5)

Sea  $A$  una matriz  $n \times n$ . Entonces  $A$  es invertible  
si y sólo si  $\det(A) \neq 0$ . Cuando  $A$  es invertible la -  
inversa está dada por:

$$A^{-1} = \frac{1}{\det(A)} (\text{Adjunta}(A))$$

Donde  $\text{Adjunta}(A)_{ij} = (-1)^{i+j} \det(J_{ji}) = J_{ji}$   
cofactor de  $A$ .

Note que la matriz adjunta es la matriz transpuesta de la matriz de los cofactores de A. (13)

#### Teorema (6)

El determinante del producto de dos matrices - es igual al producto de los determinantes de los -- factores. (13)

### 3.2. LA MATRIZ C.

En la sección 2.3. se construyó la matriz S para resolver el problema de vibraciones en una red y hallar los modos localizados, a partir del sistema de ecuaciones obtenido de las condiciones iniciales del problema. En forma matricial escribimos:

$$\beta = S \alpha \quad (31)$$

Al aplicar el método de la matriz de dispersión S, la dificultad principal radica en el hecho de expresar las  $\beta_s$  en términos de las  $\alpha_s$  a partir - de las condiciones iniciales del problema, sobre todo en problemas donde las condiciones dan origen a - un sistema de ecuaciones, cuya matriz de dispersión es de orden mayor de 2. (Recordemos que S es una -- matriz cuadrada).

Siguiendo el método de la matriz de dispersión se hallan los polos para los cuales dicha matriz de ja de ser regular, es decir, la condición, tal que S es singular, la cual nos proporciona las condiciones para la existencia de los modos localizados.

Las condiciones de frontera del problema ---- sección 2.3. nos plantea un sistema de ecuaciones - de la forma:

$$C_{11}\beta_1 + C_{12}\beta_2 + \dots + C_{1n}\beta_n = b_{11}\alpha_1 + b_{12}\alpha_2 + \dots + b_{1n}\alpha_n$$

$$C_{21}\beta_1 + C_{22}\beta_2 + \dots + C_{2n}\beta_n = b_{21}\alpha_1 + b_{22}\alpha_2 + \dots + b_{2n}\alpha_n$$

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

$$C_{n1}\beta_1 + C_{n2}\beta_2 + \dots + C_{nn}\beta_n = b_{n1}\alpha_1 + b_{n2}\alpha_2 + \dots + b_{nn}\alpha_n$$

En forma matricial escribimos:

$$C\beta = B\alpha \quad (32)$$

donde C, B son matrices cuadradas de orden n

$$C = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & \dots & C_{1n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ C_{n1} & C_{n2} & \dots & C_{nn} \end{pmatrix}$$

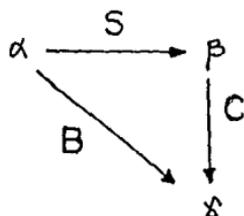
$$B = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \dots & b_{1n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{n1} & b_{n2} & \dots & b_{nn} \end{pmatrix}$$

Para resolver la ecuación matricial (32) tenemos que determinar  $C^{-1}$ , así la solución de la ecuación matricial esta dada por (31) en donde:

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

La dificultad fundamental, que existe en la obtención de la matriz S, radica en hallar la inversa de la matriz C.

De las ecuaciones (31) (32) y (33) se sigue el siguiente diagrama, (pensando en su transformación lineal asociada a cada matriz) triangular.



Es decir:

$$\beta = C^{-1} \gamma \quad (34)$$

$$\gamma = B \alpha \quad (35)$$

Luego  $\beta = C^{-1} B \alpha \quad (36)$

pero  $\beta = S \alpha \quad (37)$

Finalmente tenemos  $S = C^{-1} B$

Así las cosas, para determinar los modos localizados en un problema de vibraciones en redes, donde sus condiciones iniciales nos plantean un sistema de ecuaciones de la forma (32) no es necesario construir a la matriz de dispersión  $S$  y determinar sus polos, basta pedir que la matriz  $C$  sea singular. Es decir es suficiente  $\det |C| = 0$

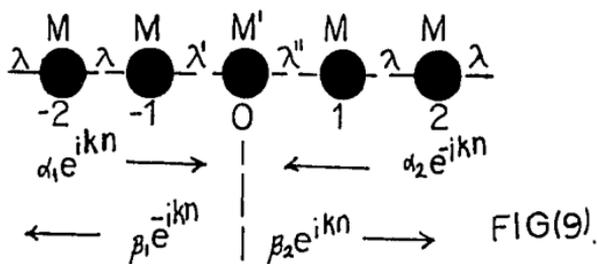
## CAPITULO 4

RED LINEAL MONOATOMICA INFINITA  
CON IMPUREZA AL CENTRO Y  
CONSTANTES DE INTERACCION A  
PRIMEROS VECINOS DIFERENTES  
ATRAVES DE LA MATRIZ C.

## CAPITULO 4

### 4. RED LINEAL MONOATOMICA INFINITA CON IMPUREZA AL CENTRO Y CONSTANTES DE INTERACCION A PRIMEROS VECINOS DIFERENTES, ATRAVES DE LA MATRIZ C.

Considérese al modelo consistente en una red lineal monoatómica infinita con una impureza al centro y constantes de interacción a primeros vecinos diferentes, como se observa en la fig. (9).



Supondremos que el parámetro de la red es unitario.  $K$  el número de onda.  $u_n$  el desplazamiento del  $n$ -ésimo átomo de su posición de equilibrio y  $\lambda \neq \lambda' \neq \lambda''$  las constantes de fuerza de restitución  $M$  y  $M'$  las masas de los átomos regular y de

impureza respectivamente.

Las ecuaciones de movimiento a primeros vecinos están dadas por (la primera ecuación es la misma que la ecuación de movimiento de la red perfecta.)

$$M\omega^2 U_n + \lambda(U_{n+1} + U_{n-1} - 2U_n) = 0 \quad n \neq 0 \quad (38a)$$

$$M\omega^2 U_0 + \lambda'(U_{-1} - U_0) + \lambda''(U_1 - U_0) = 0 \quad n=0 \quad (38b)$$

La solución se expresa en términos de combinación lineal de ondas planas, ondas entrantes y ondas que se dispersan. Véase fig. (9).

$$U_n = \alpha_1 e^{ikn} + \beta_1 e^{-ikn} \quad n \leq 0 \quad (39a)$$

$$U_n = \beta_2 e^{ikn} + \alpha_2 e^{-ikn} \quad n \geq 0 \quad (39b)$$

La solución debe ser continua en  $n=0$  luego - se sigue:

$$\alpha_1 + \beta_1 = \alpha_2 + \beta_2 \quad (40)$$

Sustituyendo la solución  $U_0, U_{-1}, U_1$ , respectivamente en la ecuación 38.b, se tiene, ecuación (41)

$$M\omega^2(\alpha_1 + \beta_1) + \lambda'(\alpha_1 e^{-ik} + \beta_1 e^{ik}) - (\alpha_1 + \beta_1) + \lambda''(\beta_2 e^{ik} + \alpha_2 e^{-ik}) - (\alpha_1 + \beta_1) = 0$$

De esta ecuación y (40) podríamos escribir - en forma matricial.

$$\begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} \quad (42)$$

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

y después buscar la condición para que S sea una matriz singular.

Utilizando la matriz C, podemos escribir:

$$C\beta = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} \\ C_{21} & C_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} = B\alpha \quad (43)$$

Si C tiene matriz inversa  $\beta = C^{-1} B\alpha$  y ----  
 $S = C^{-1} B$ , luego la matriz S es singular si y solo si la matriz C, lo es. Por tanto la condición se traduce a  $\det |C| = 0$

Hallemos los coeficientes de la matriz C.  
 Escribiendo la ecuación 43 explícitamente:

$$I) C_{11} \beta_1 + C_{12} \beta_2 = b_{11} \alpha_1 + b_{12} \alpha_2$$

$$II) C_{21} \beta_1 + C_{22} \beta_2 = b_{21} \alpha_1 + b_{22} \alpha_2$$

De (40) se sigue  $\beta_1 - \beta_2 = \alpha_1 - \alpha_2$  luego considerando (II) se obtiene:

$$C_{21} = 1 \quad C_{22} = -1 \quad b_{21} = 1 \quad b_{22} = -1$$

Ahora de (41) se tiene:

$$(M'w^2 + \lambda' e^{ik} - \lambda'' - \lambda''') \beta_1 + \lambda'' e^{ik} \beta_2 = (M'w^2 - \lambda' e^{-ik} + \lambda' + \lambda''') \alpha_1 - \lambda'' e^{-ik} \alpha_2$$

Así:

$$c_{11} = M'w^2 + \lambda' e^{ik} - \lambda' - \lambda'' \quad b_{11} = -M'w^2 - \lambda' e^{-ik} + \lambda' + \lambda''$$

$$c_{12} = \lambda'' e^{ik} \quad b_{12} = -\lambda'' e^{-ik}$$

Observe que estos coeficientes solo difieren en sig no y argumento es decir:

$c_{11} = -\overline{b_{11}}$  y  $c_{12} = -\overline{b_{12}}$  donde la barra denota el complejo conjugado.

Así las cosas la matriz C se escribe:

$$C = \begin{pmatrix} \frac{M'}{M} 2 \lambda (1 - \cos k) + \lambda e^{ik} - \lambda' - \lambda'' & \lambda'' e^{ik} \\ & \\ & 1 & & -1 \end{pmatrix}$$

#### 4.1. CALCULO DE LA RELACION DE DISPERSION DE MODOS LOCALIZADOS.

Para que la matriz C sea singular,  $\det |C| = 0$  es decir:

$$\boxed{(\lambda'' + \lambda') (1 - e^{ik}) + \lambda \left( \frac{-2M'}{M} (1 - \cos k) \right) = 0} \quad (44)$$

La cual es la ecuación secular en la que tenemos -- que analizar la existencia o no de modos localizados.

$$\text{sea } K = \pi + i\theta, Q = \frac{M'}{M}, \quad \delta = \lambda' + \lambda''$$

sustituyendo en (44) se obtiene la ecuación de segundo grado en  $e^\theta$

$$(-\lambda Q)e^{2\theta} + (\delta - 2\lambda Q)e^\theta + (\delta - \lambda Q) = 0 \quad (45)$$

resolviendo según la fórmula general se obtiene:

$$e_1^\theta = -1 \quad e_2^\theta = \frac{\delta - \lambda Q}{\lambda Q} \quad (46)$$

$e_1^\theta$  no la consideramos

$$e^{ik} = -e^{-\theta} \text{ sustituyendo este valor en} \quad (44)$$

$$(\lambda'' + \lambda') (1 + e^{-\theta}) + \lambda \left( \frac{-2M'}{M} (1 - \cos k) \right) = 0$$

pero  $1 - \cos k = \frac{Mw^2}{2\lambda}$  así

$$w^2 \left( \frac{M}{\lambda'' + \lambda'} \right) = \frac{1}{Q} \left( 1 + \frac{1}{e^\theta} \right) \quad (47)$$

para  $\theta > 0$ ,  $e^\theta > 1$ , luego  $e^\theta = \frac{\lambda'' + \lambda' - \lambda Q}{\lambda Q} > 1$

como  $Q > 0$ ,  $\lambda > 0$ ,  $\lambda'' + \lambda' - \lambda Q > \lambda Q$  así

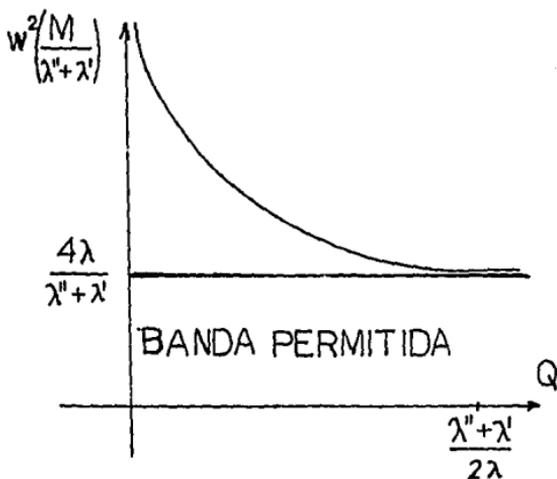
$$0 < Q < \frac{\lambda'' + \lambda'}{2\lambda} \quad (48)$$

Note

$$\lim_{Q \rightarrow \frac{\lambda'' + \lambda'}{2\lambda}} e^{\theta} = \lim_{Q \rightarrow \frac{\lambda'' + \lambda'}{2\lambda}} \frac{\lambda'' + \lambda' - \lambda Q}{\lambda Q} = 1$$

$$\lim_{Q \rightarrow \frac{\lambda'' + \lambda'}{2\lambda}} \frac{1}{Q} (1 + e^{-\theta}) = \frac{4\lambda}{\lambda'' + \lambda'} \quad (49)$$

Graficando  $w^2$  vs.  $Q$



FIG(10).

#### 4.2. ANALISIS DE RESULTADOS

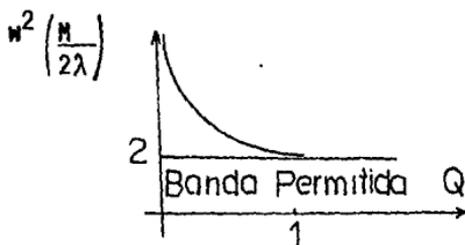
Mostraremos que los resultados obtenidos en la sección 4 y 4.1. através de la matriz  $C$ , son los mismos que se obtienen en la sección 2.3. --- através de la matriz de dispersión  $S$ , cuando,  $\lambda = \lambda' = \lambda''$  Así también calcularemos la matriz  $S$ , utilizando la matriz inversa  $C^{-1}$ , mostrando que la singularidad de  $S$  equivale a  $\det |C| = 0$ .

Si  $\lambda = \lambda' = \lambda''$  la ecuación (46)

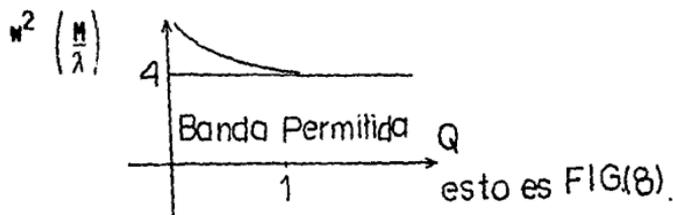
$$e_2^{\theta} = \frac{\lambda' - \lambda \theta}{\lambda \theta} \quad (\lambda' = \lambda' + \lambda'') \text{ se reescribe}$$

$$e_2^{\theta} = \frac{2 - \theta}{\theta} \text{ es decir (27)}$$

y la figura 10 se escribe:



ó equivalentemente:



Calculemos  $C^{-1}$  y S.

Sea  $C^{-1} = \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} \\ h_{21} & h_{22} \end{pmatrix}$  se debe satisfacer

$$CC^{-1} = \begin{pmatrix} c_{11}h_{11} + c_{12}h_{21} & c_{11}h_{12} + c_{12}h_{22} \\ h_{11} - h_{21} & h_{12} - h_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

luego  $h_{11} = h_{21}$ ;  $c_{11}h_{11} + c_{12}h_{21} = 1$  esto implica  
 $h_{11}(c_{11} + c_{12}) = 1$  es decir  $h_{11} = \frac{1}{c_{11} + c_{12}} = h_{21}$

Ahora  $h_{12} = 1 + h_{22}$ , luego  $c_{11}h_{12} + c_{12}h_{22} = 0$  se traduce a;  $c_{11}(1+h_{22}) + c_{12}h_{22} = 0$  implica ---

$$h_{22} = \frac{-c_{11}}{c_{11} + c_{12}} \text{ así}$$

las cosas,  $h_{12} = 1 - \frac{c_{11}}{c_{11} + c_{12}} = \frac{c_{12}}{c_{11} + c_{12}}$  la matriz

C es conocida, por tanto:

$$C^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{c_{11} + c_{12}} & \frac{c_{12}}{c_{11} + c_{12}} \\ \frac{1}{c_{11} + c_{12}} & \frac{-c_{11}}{c_{11} + c_{12}} \end{pmatrix}$$

Explicitamente

$$C^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\frac{M'}{M} 2\lambda(1-\cos k) + \lambda'(e^{ik}-1) + \lambda''(e^{ik}-1)} & \frac{\lambda'' e^{ik}}{\frac{M'}{M} 2\lambda(1-\cos k) + \lambda'(e^{ik}-1) + \lambda''(e^{ik}-1)} \\ \frac{1}{\frac{M'}{M} 2\lambda(1-\cos k) + \lambda'(e^{ik}-1) + \lambda''(e^{ik}-1)} & \frac{-\frac{M'}{M} 2\lambda(1-\cos k) + \lambda'(1-e^{ik}) + \lambda''}{\frac{M'}{M} 2\lambda(1-\cos k) + \lambda'(e^{ik}-1) + \lambda''(e^{ik}-1)} \end{pmatrix}$$

Observe  $c_{11} + c_{22} = |c_{11}c_{22} - c_{21}c_{12}| = \det |C|$   
 luego  $C^{-1} = \frac{1}{\det |C|} \text{Adj}(C)$

$$S = C^{-1}B = \frac{1}{\det |C|} \begin{pmatrix} 1 & \lambda'' e^{ik} & -M'w^2 - \lambda' e^{ik} + \lambda' + \lambda'' & -\lambda'' e^{ik} \\ 1 & \frac{-\frac{M'}{M} 2\lambda(1-\cos k) + \lambda'(1-e^{ik}) + \lambda''}{\frac{M'}{M} 2\lambda(1-\cos k) + \lambda'(e^{ik}-1) + \lambda''(e^{ik}-1)} & 1 & -1 \end{pmatrix}$$

La matriz de dispersion.

$$S = \begin{pmatrix} \frac{-\lambda \frac{2M'}{M} (1 - \cos k) + \lambda' (1 - e^{-ik}) + \lambda'' (1 + e^{ik})}{\det |C|} & \frac{-\lambda'' 2 \cos k}{\det |C|} \\ \frac{(-\frac{4M'}{M} \lambda + 2\lambda') (1 - \cos k) + 2\lambda''}{\det |C|} & \frac{\lambda \frac{2M'}{M} (1 - \cos k) + \lambda' (e^{ik} - 1) + \lambda'' (-e^{-ik} - 1)}{\det |C|} \end{pmatrix}$$

$$\det |C| = (\lambda' + \lambda'') (e^{ik} - 1) + \frac{2\lambda M'}{M} (1 - \cos k).$$

Es decir C es singular si y solo si S lo es.

ESTA TESIS NO DEBE  
SALIR DE LA BIBLIOTECA

CONCLUSION

## CONCLUSION

Con el modelo armónico clásico, aplicado a problemas de vibraciones en redes lineales monoatómicas infinitas con impureza al centro, Fukuda<sup>(5)</sup> resuelve el problema sin cambiar la constante de interacción a primeros vecinos del átomo impureza, utilizando el método de la matriz de dispersión. El método de la matriz C propuesto por Saavedra<sup>(14)</sup>, es equivalente en cuanto a la obtención de modos localizados.

El método de la matriz C resuelve el problema de la red lineal monoatómica infinita con impureza al centro y constantes de interacción a primeros vecinos diferentes, de forma sencilla e inmediata (véase capítulo 4). Problema que resuelto con el uso de la matriz de dispersión lleva a cálculos laboriosos (véase sección 4.2.).

Según los extractos del álgebra lineal (considerados en el capítulo 3) las condiciones de equivalencia entre la singularidad de la matriz  $S$  y la matriz  $C$ , demuestran la equivalencia entre los métodos de la matriz de dispersión y la matriz  $C$ .

El modelo matemático mostrado en el presente trabajo, es sencillo y de posible aplicación a otros problemas de la Física.



- |                             |  |   |
|-----------------------------|--|---|
| 9) Andrade y<br>Zurita      | Modos localizados<br>en interfase.                                       | Bol. Soc. Mex. de -<br>Física.<br>No. 3 Nov. 1978.<br>Pag. 193.   |
| 10) Mc. Kelvey              | Solid State and<br>Semiconductor -<br>Physics.                           | Harper and Row.   |
| 11) Alonso M<br>Finn Ed.    | Física V. 1<br>Mecánica  | Fondo Educativo<br>Interamericano                                 |
| 12) C. Kittel               | Introduction To<br>Solid State ---<br>Physics.                           | Wiley   |
| 13) K. Hoffman<br>R. Kunze. | Álgebra Lineal   | Prentice Hall   |
| 14) C.H. Saavedra           | Técnica de la<br>matriz C, en el<br>tratamiento de<br>modos localizados. | Bol. Esp. S.M.F.<br>6-2 (1992), 72.                               |
| 15) GONZALEZ Y<br>BORAU.    | VIDEO:<br>Modos Normales de<br>vibración, en ---<br>oscilador acoplado.  | U.N.A.M.<br>Fac. Ciencias<br>Laboratorio de<br>Mecánica.<br>1990. |

- 16) R. WEINSTOCK. Normal-Mode Amer. J. Phys.  
Frequencies of V. 39,484  
Finite One-Di- May 1971.  
mensional ----  
Lattices with  
single Mass --  
Defect: Exact  
solutions.
- 17) FEYMAN/ Fisica Addison  
LEIGITTON Mecánica Cuán- Wesley.  
tica. V. III.
- 18) K.R. SYMON. Mechanics. Addison  
Wesley.