

2 ej. vna



# UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

## “EFECTO ISOTÓPICO DE LOS MODOS LOCAL Y BRECHA DE BORO EN FOSFURO DE GALIO”

### T E S I S

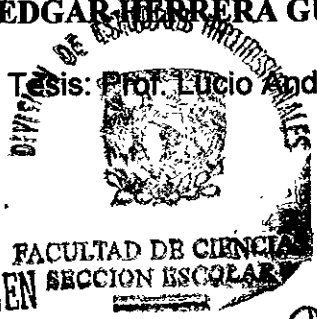
QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

### F Í S I C O

P R E S E N T A :

### EDGAR HERRERA GUZMÁN

Director de Tesis: Prof. Lucio Andrade Buendía



1998

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

FACULTAD DE CIENCIAS  
SECCION ESCOLAR

265665



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



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

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

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.



UNIVERSIDAD NACIONAL  
AVENIDA DE  
MEXICO

M. en C. Virginia Abrín Batule  
Jefe de la División de Estudios Profesionales de la  
Facultad de Ciencias  
P r e s e n t e

Comunicamos a usted que hemos revisado el trabajo de Tesis:  
"Efecto Isotópico de los modos local y brecha de boro en fosfuro de Galio"

realizado por HERRERA GUZMAN EDGAR

con número de cuenta 9150751-2 , pasante de la carrera de Física.

Dicho trabajo cuenta con nuestro voto aprobatorio.

Atentamente

Director de Tesis

Propietario

FIS. LUCIO ANDRADE BUENDIA 

Propietario

DR. JORGE FLORES VALDES 

Propietario

DR. EUGENIO LEY KOO 

Suplente

DR. MANUEL DE LLANO DE LA GARZA 

Suplente

FIS. MARGARITA SANCHEZ Y SANCHEZ 

Consejo Departamental de Física 

DR. ROBERTO ALEJANDRO RUELAS MAYORGA  
Coordinador de Licenciatura



FACULTAD DE CIENCIAS  
DEPARTAMENTO DE FISICA

"a

MIS PAPÁS

&

HERMANOS"

## Agradecimientos:

A mis papás (Rafael y Teresa) y hermanos (Haydeé, Rafael y Karina), quienes en todo momento me apoyaron y motivaron.

Al Profesor Lucio Andrade por haber propuesto y dirigido ésta tesis, así como por su amistad, interés y dedicación.

Al Dr. Rafael Herrera Gómez y la Modista Teresa Guzmán Martínez, quienes siempre me brindaron su mejor opinión y crítica.

A la Física Margarita Sánchez y Sánchez por su invaluable ayuda.

Al Dr. Rafael Herrera Guzmán por sus asesorías tan importantes.

A los Doctores Arturo Quintanar Isaías y Alejandro Ruelas Mayorga, quienes me apoyaron y creyeron en mí, permitiéndome salir adelante.

Al Matemático Mario Rodríguez Dreen por sus consejos y atenciones.

A los Doctores Manuel de Llano, Jorge Flores y Eugenio Ley Koo por los comentarios que contribuyeron al mejoramiento de este trabajo, así como por haber aceptado ser mis sinodales.

A la Facultad de Ciencias y el Laboratorio de Núcleos Fracturados de la División de Estudios de Posgrado de la Facultad de Ingeniería, por permitirme el uso de sus instalaciones y equipos de cómputo.

A todos mis maestros de la facultad por los conocimientos adquiridos.

# Índice

	Pág.
Índice de figuras.	4
Introducción.	6
<b>CAPÍTULO I.</b>	
<b>PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA</b>	<b>9</b>
1.1 Antecedentes del problema de localización.	9
1.2 El cristal tipo zinc - blenda.	20
1.3 Resultados experimentales para $\text{GaP}^{10,11}\text{B}$ y $\text{AlAs}^{12,13}\text{C}$ .	21
1.4 Resultados obtenidos con el modelo de masas.	25
<b>CAPÍTULO II.</b>	
<b>EL MODELO DE IMPERFECCIÓN</b>	<b>31</b>
2.1 Mediciones experimentales y modelos teóricos.	31
2.2 El modelo de imperfección.	42
2.3 Aplicación del modelo al $\text{GaP}^{10,11}\text{B}$ y $\text{AlAs}^{12,13}\text{C}$	47
<b>CAPÍTULO III.</b>	
<b>RESULTADOS Y CONCLUSIONES</b>	<b>55</b>
3.1 Resultados.	55
3.2 Conclusiones.	69
3.3 Trabajo a futuro.	71
<b>Apéndice A.</b>	
Ecuación de valores propios del modelo de imperfección.	72
<b>Apéndice B.</b>	
Listados de los programas utilizados.	80
<b>Apéndice C.</b>	
Técnicas de espectroscopía.	93
<b>Apéndice D.</b>	
Tablas de fonones localizados	99
<b>BIBLIOGRAFÍA</b>	<b>143</b>

# *Índice de figuras*

	Pág.
1. Espectro de absorción del KCl.	11
2. Celda unitaria de un cristal tipo Zinc - blenda	20
3. Espectro de Frecuencias del Fosfuro de Galio	22
4. Espectro de Frecuencias del Arsenuro de Aluminio	23
5. Red lineal diatómica con dos masas y dos constantes de interacción	26
6. Frecuencias de oscilación en función del número de onda	27
7. Red diatómica con una sustitución isotópica en el sitio "y <sub>0</sub> "	28
8. Espectro de Frecuencias del Fosfuro de Galio (GaP) con Boro (B) para el modelo de masas	30
9. Espectro de Frecuencias del Fosfuro de Galio (GaP) con Boro (B) para modelos teóricos publicados	38
10. Red diatómica con una sustitución no isotópica en el sitio "y <sub>0</sub> "	42
11. Modos localizados con el ajuste de los puntos $\omega_{TO_L}$ y $\omega_{TA_L}$ para el <sup>10</sup> B.	59
12. Corrimiento isotópico de los modos localizados con el ajuste de	

los puntos $\omega_{TO_L}$ y $\omega_{TA_L}$ para el $^{11}\text{B}$ .	60
13. Modos localizados con el ajuste de los puntos $\omega_{TO_r}$ y $\omega_{TA_L}$ para el $^{10}\text{B}$ .	61
14. Corrimiento isotópico de los modos localizados con el ajuste de los puntos $\omega_{TO_r}$ y $\omega_{TA_L}$ para el $^{11}\text{B}$ .	62
15. Modos localizados con la variación de la " $\rho_1$ " y " $\rho_2$ " con cada " $\rho$ " para el $^{10}\text{B}$ .	63
16. Corrimiento isotópico de los modos localizados con la variación de la " $\rho_1$ " y " $\rho_2$ " con cada " $\rho$ " para el $^{11}\text{B}$ .	66
17. Modos localizados con el ajuste de los puntos $\omega_{TO_r}$ y $\omega_{TO_L}$ para el $^{12}\text{C}$ .	67
18. Corrimiento isotópico de los modos localizados con el ajuste de los puntos $\omega_{TO_r}$ y $\omega_{TO_L}$ para el $^{13}\text{C}$ .	68
C.1. Comparación de la dispersión de neutrones con otras técnicas	97



# *Introducción*

Uno de los objetivos del Estado Sólido es el estudio de las propiedades físicas de los cristales utilizando los elementos de simetría para la resolución de problemas. En algunos casos se usan los espectros de absorción o emisión fotónica infrarroja, la espectroscopía Raman, o la de neutrones de baja energía, etc. Tanto en redes cristalinas como en redes con imperfecciones, midiéndose las modificaciones de dichos espectros. Esto es importante a nivel macroscópico, porque el comportamiento de los cristales a este nivel se manifiesta de acuerdo al grado de pureza o la concentración de impurezas que tenga el cristal.

La influencia de las imperfecciones en las propiedades de los cristales ha sido estudiada por muchos autores (Barker & Sievers, 1975) a través del coeficiente de absorción óptica. Este coeficiente refleja la interacción entre los fotones de la radiación electromagnética y los fonones del cristal, del cual se dispone de una gran cantidad de resultados experimentales, así como de datos obtenidos por espectroscopía Raman y neutrones de baja energía para el fosfuro de galio (ver Tabla I, pág. 24).

Además, existen otros fenómenos que también describen la interacción fotónica y la fonónica, como la interacción con los modos localizados y brecha del cristal. De estos fenómenos existen teorías publicadas para el fosfuro de galio (ver Tabla III, pág. 39) y el arsenuro de aluminio (Robbie et al., 1995). Sin embargo, a pesar de los avances aun no se han logrado explicar a nivel cuántico satisfactoriamente la aparición de las frecuencias localizadas de manera simultánea al realizarse esta interacción, como se observa al compararlos con los resultados experimentales (ver fig. 9, pág. 38). Esto es muy importante, pues al hacer la comparación de las medidas experimentales con los modelos teóricos se obtiene información de la colocación de los átomos de imperfección en el cristal. Este conocimiento es fundamental en los procesos tecnológicos con

semiconductores y tiene una aplicación práctica inmediata. Esto ha llevado al planteamiento de modelos con potenciales de interacción atómica cada vez mas complicados, pero muy difíciles de resolver (ver sección 2.1.e, pág. 34).

El objetivo de este trabajo es estudiar el efecto isotópico de los fonones localizados (local y brecha) que se producen al incorporar boro en la red de fosforo de galio o carbón en arsenuro de aluminio. Para esto calculamos las frecuencias de los fonones localizados en una red diatómica infinita de masas puntuales con una impureza sustitucional en cualesquiera de sus isótopos, considerando la modificación de los potenciales de interacción entre la masa de imperfección y los primeros vecinos, a lo largo del eje de simetría denotado como  $(\xi, \xi, \xi)$ , mediante el uso de un método matemático nuevo (Andrade L., 1989; Andrade L., 1977<sup>a</sup>; Andrade L., 1981) que simplifica el problema de muchos cuerpos al cálculo de una ecuación de valores propios y que proporciona soluciones analíticas y cerradas. Ésta es la técnica de las ecuaciones de diferencias finitas.

Este caso de la física matemática es un problema abierto no resuelto en la literatura que sólo ha sido estudiado de forma numérica con soluciones heurísticas. Técnicas matemáticas tan poderosas como lo son las funciones de Green o aun el planteamiento de las ecuaciones de Dyson, tienen la limitante de resolver analíticamente y de forma cerrada sólo problemas de redes monoatómicas o diatómicas de Born con una sustitución isotópica de la masa de imperfección (Taylor, 1970; Patterson, 1971).

El introducir una impureza sustitucional en una red como la antes mencionada es tan drástico, que produce nuevas frecuencias en el espectro del cristal, en la rama prohibida conocida como fonón - brecha y otra con un pico de intensidad muy grande conocida como frecuencia local. Además, modifica un poco la frecuencia y la forma de todos los fonones de esta red. Este comportamiento de los fonones en los cristales con simetría Zinc - blenda (tetrahedral) que forman las columnas IIIA-VA y IVA-VIA de la tabla periódica parece ser que es tan difícil de describir de manera analítica y cerrada con las técnicas matemáticas tradicionales que en la literatura solo 4 de 11 trabajos publicados (ver Tabla III, pág. 39) han encontrado simultáneamente estos fonones localizados, pero

los valores obtenidos no corresponden con los experimentales. En particular el efecto isotópico del modo brecha está muy alejado del resultado medido en los experimentos.

Esta tesis se divide en tres capítulos, a lo largo de los cuales se espera llegar a la motivación para la continuación de esta línea de estudio que constituye en sí una teoría y manera de atacar problemas en la física matemática teórica.

En el capítulo I, se hace al principio una pequeña reseña histórica a manera de introducción tanto del inicio de la solución del problema matemático, como de los primeros experimentos en los que se midieron las frecuencias de los fonones localizados. Después se describe cualitativamente la aproximación de Born - Oppenheimer y brevemente el método de la segunda cuantización para las vibraciones cristalinas. Se mencionan también los casos tratados en la literatura para calcular las frecuencias fonónicas en redes sencillas con imperfecciones. Se presentan los resultados experimentales obtenidos para las vibraciones del fosforo de galio y arsenuro de aluminio limpios, y con imperfecciones de boro y carbón, respectivamente. Finalmente, se presentan algunos de los resultados obtenidos en un cálculo anterior para un modelo en el que solamente se cambia la masa del átomo imperfección.

El capítulo II, muestra el planteamiento del problema para el cristal diatómico tetrahedral, al cual se le coloca de forma sustitucional una impureza con una concentración aproximada de una parte por millón. Se considera la modificación de los potenciales efectivos de interacción entre los átomos, por lo que se denomina al modelo "*modelo de imperfección*". Se discute la forma de la ecuación de valores propios resultante y se encuentran los fonones o modos local y brecha generados simultáneamente por la impureza. Ahora se cambia por el otro isótopo y se obtiene el corrimiento isotópico de los modos localizados. Por la dinámica de la red que presenta el cristal fosforo de galio, se considera también al cristal arsenuro de aluminio. En el capítulo III se comparan y dan las conclusiones de los resultados con los experimentos y con otros modelos teóricos.

# *Capítulo I*

## Planteamiento del Problema

### 1.1 Antecedentes del problema de localización.

Aproximadamente desde 1950 se ha dado un incremento de físicos experimentales del estado sólido dedicados al estudio de cristales con impurezas distribuidas espacialmente de manera aleatoria o irregular. Esto sucede posiblemente a que la mayor parte de los materiales que nos rodean o con los que tenemos contacto tienen una estructura cristalina y ésta es fácil de estudiar, ya que los sistemas amorfos son más complejos. De hecho, el entendimiento teórico de los sistemas aleatorios ha tenido un desarrollo muy lento, mientras que la tecnología ha requerido de la implementación de nuevos materiales, por lo que ha sido necesario utilizar métodos empíricos conocidos como ensayo y error. Sin embargo, es necesario hacer un estudio teórico completo de los sistemas cristalinos con impurezas.

Elliot, Krumhansl y Leath, (1974), hicieron una revisión detallada de la literatura disponible para averiguar el entendimiento teórico real encontrando que la mayor parte de los artículos tratan de técnicas que usan la teoría de perturbaciones en problemas de muchos cuerpos, particularmente con ayuda de las funciones de Green, así como con el desarrollo de computadoras lo suficientemente poderosas para calcular los resultados de modelos con tantos parámetros que sus soluciones son realizadas con el uso de métodos numéricos.

Este trabajo parte de las características dinámicas de las vibraciones de la red perfecta, pues los cristales puros son representados con modelos teóricos. En muchos casos, la introducción de defectos puede ser vista como la causa de las alteraciones de los estados vibracionales del cristal puro. Así mismo, los nuevos estados vibracionales pueden ser sólo estados cristalinos ligeramente perturbados, o bien modos completamente nuevos. Estos estados sirven para estudiar las redes cristalinas tanto con defectos como en bulto. El interés por las propiedades ópticas de los cristales con defectos ha sido permanentemente mostrado por el hombre, como lo evidencia el gran aprecio por las gemas, las cuales presentan un colorido, resultado de los efectos ópticos asociados con los defectos localizados.

El efecto de ciertas clases de impurezas o desorden en las frecuencias de los modos normales de vibración de un sistema de partículas fue estudiado teóricamente (Barker & Sievers, 1975) primero por Lord Rayleigh (1890's). El resultado principal desde éste punto de vista, fue el encontrar las condiciones bajo las cuales la frecuencia de un modo vibracional podía ser separado de la banda de frecuencias de los modos del cristal perfecto y existir arriba de la máxima frecuencia del sistema sin perturbar.

La frecuencia de este modo fue observada experimentalmente por primera vez por Schæfer en 1960. En la figura 1 se muestra la frecuencia del modo debido a la impureza del ión hidrógeno en cloruro de potasio del trabajo anterior. Además de tener un pico muy angosto y una frecuencia muy alta este modo es *localizado*, es decir, su vector propio no tiene una dependencia sinusoidal u ondulatoria en el espacio pero presenta un pico muy intenso en los desplazamientos (máximos) del átomo impureza y de los átomos vecinos cuyos desplazamientos (máximos) decaen rápidamente alrededor de uno o dos sitios de la red. De este resultado proviene el término *modo localizado*. Desde la

observación experimental de Schaefer, muchas clases de modos localizados asociados con los defectos se han observado. Estos incluyen modos localizados de baja frecuencia, llamados modos resonantes. Ambos modos localizados, los del tipo de alta frecuencia y los resonantes son de gran interés, pues permiten conocer al átomo impureza o defecto y a su vecindad. Algunos estudios de modos localizados han sido usados como un método de diagnóstico para la identificación de impurezas, tanto en el tipo como en la localización dentro de la red (Barker & Sievers, 1975). De esta forma, se han especializado las técnicas espectroscópicas para la dinámica de un sólido a nivel microscópico, sobresaliendo para el caso de los cristales con simetría del tipo Zinc - blenda la espectroscopía infrarroja, la Raman y la de neutrones de baja energía (ver apéndice C). Con esta descripción cualitativa del fenómeno, se muestra la importancia que tienen las impurezas en los cristales. Para entender las redes cristalinas, es necesario desarrollar el tratamiento mecánico cuántico del problema de muchos cuerpos, desde el oscilador armónico cuántico, hasta la generalización en la red diatómica.

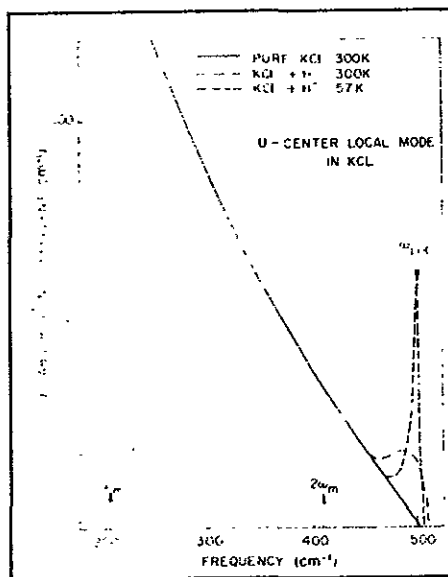


Fig. 1. Espectro de absorción del KCl en frecuencias superiores a la máxima frecuencia fonónica  $\omega_m$  (Barker y Sievers, 1975, pág. S4).

La suposición de que el movimiento de los átomos es descrito con potenciales armónicos simples está basada en los argumentos de la aproximación conocida como de Born - Oppenheimer (Patterson, 1971 pág. 29; Andrade L., 1978). En esta aproximación, conocida también como *adiabática*, se explica uno de los modos de excitación de la energía interna de los cristales, que es la vibración de la red, tratando de forma separada el movimiento de los electrones y las vibraciones de la red. Para fundamentar esta aproximación, se considera la ecuación de onda de Schrödinger:

$$H\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad \dots(1)$$

que es la ecuación de muchos cuerpos. Donde H es el Hamiltoniano, y  $\Psi$  es una función dependiente de todas las coordenadas electrónicas, nucleares y del tiempo:

$$\Psi = \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}, t) \quad \dots(2)$$

en (2)  $\mathbf{r}$  son las coordenadas electrónicas y  $\mathbf{R}$  las coordenadas nucleares. Con estas coordenadas, el Hamiltoniano del sistema es:

$$H = -\sum_i \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - \sum_k \frac{\hbar^2}{2M_k} \nabla_k^2 + \frac{1}{2} \sum_{i,j;i \neq j} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|r_i-r_j|} - \sum_{i,k} \frac{e^2 Z_k}{4\pi\epsilon_0|r_i-R_k|} + \frac{1}{2} \sum_{k,k';k \neq k'} \frac{e^2 Z_k Z_{k'}}{4\pi\epsilon_0|R_k-R_{k'}|} \quad \dots(3)$$

donde  $m$  es la masa electrónica,  $M_k$  es la masa del núcleo localizado en  $\mathbf{R}_k$ ,  $Z_k$  es el número atómico del núcleo en  $\mathbf{R}_k$ , y  $e$  tiene la magnitud de la carga electrónica. Las sumas sobre  $i$  y  $j$  corren sobre todos los electrones, mientras que las sumas en  $k$  y  $k'$  corren sobre todos los núcleos. El primer sumando representa la energía cinética de los electrones. El segundo término la energía cinética de los núcleos. El tercero la energía potencial Coulombiana de la interacción entre electrones. El cuarto la energía potencial Coulombiana de la interacción entre electrones y núcleos. El quinto la energía potencial Coulombiana de la interacción entre los núcleos. Todas las otras interacciones no se consideran por suponerse pequeñas comparadas con las Coulombianas. Es importante notar que el Hamiltoniano en la

ecuación (3) representa la energía de los estados estacionarios del sistema, pues este Hamiltoniano se construye para estados independientes del tiempo. Además, los electrones y los núcleos son tratados como cargas puntuales. La función de onda de la ecuación (2), tiene tantos grados de libertad como los del espacio y es una función del tiempo.

Agrupando los términos del Hamiltoniano de la ecuación (3):

$$H = T_e + U + T_n \quad \dots(4)$$

con  $T_e$  la energía cinética de los electrones,  $T_n$  la energía cinética de los núcleos, y  $U$  la energía Coulombiana total de interacción entre los núcleos y los electrones y considerando que los núcleos tienen una masa mucho mayor que los electrones, en general tendrán también una energía cinética muy pequeña y definiendo:

$$H_0 = T_e + U \quad \dots(5)$$

la ecuación (4) queda expresada como:

$$H = H_0 + T_n \quad \dots(6)$$

con lo que  $T_n$  se interpreta como una perturbación de  $H_0$ . También tomamos la masa nuclear media y definimos una  $K$  y  $H_L$  de la siguiente forma:

$$K \equiv \left(\frac{m}{M_0}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$H_L \equiv -\sum_j \frac{M_0}{M_j} \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_j^2 \quad \dots(7)$$

así que la energía cinética nuclear es:

$$T_n = K^4 H_L$$

$$\Rightarrow H = H_0 + K^4 H_L \quad \dots(8)$$

La ecuación de onda de Schrödinger electrónica independiente del tiempo es:

$$H_0 \psi(\mathbf{r}_i, \mathbf{R}_j) = E \psi(\mathbf{r}_i, \mathbf{R}_j) \quad \dots(9)$$

si suponemos que los núcleos están fijos en sus posiciones  $\mathbf{R}_j$ :

$$\Rightarrow H_0 \phi(\mathbf{r}_i, \mathbf{R}_j) = E^0 \phi(\mathbf{r}_i, \mathbf{R}_j) \quad \dots(10)$$



Al hacer el desarrollo en teoría de perturbaciones de la solución de la ecuación (9) en potencias de  $K$  se muestra (Born y Huang, 1954; Andrade L., 1977<sup>b</sup>) que si el desarrollo es llevado a segundo orden en  $K$ , es posible la separación de los estados electrónicos  $n$  como  $\psi_n(\mathbf{r}_i, \mathbf{R}_j) = \phi_n(\mathbf{r}_i, \mathbf{R}_j)X(\mathbf{R}_j)$ . Por lo que la función de onda total puede ser escrita como el producto de la función de onda electrónica, dependiendo sólo de las coordenadas electrónicas con las posiciones de los núcleos fijos; con la función de onda nuclear, que depende sólo de las coordenadas nucleares con los electrones en algún estado fijo. Así, los electrones proveen una energía potencial efectiva para el movimiento de los núcleos mientras el movimiento de los núcleos continuamente deforma la función de onda de los electrones, en vez de causar cambios repentinos. De forma tal que en la representación energética, la ecuación de onda de Schrödinger independiente del tiempo para los núcleos resulta (ver Patterson, 1971; pág. 33 y Andrade L., 1977<sup>b</sup>, 1978) ser  $(T_{\text{nuclear}} + U_{\text{efectivo}} - E)\Psi_n = 0$ . Además, al evaluar a segundo orden la función de onda en  $K$ , la energía potencial efectiva de los núcleos involucra desplazamientos hasta de cuarto orden. Al desarrollar a segundo orden la energía potencial nuclear en los desplazamientos nucleares, se llega a la aproximación armónica.

En el caso del tratamiento de las vibraciones de cristales, se tiene un sistema mecánico cuántico constituido por un número muy grande de partículas que pueden interactuar arbitrariamente (Landau, 1983), en el cual resulta útil un método particular de análisis conocido por el nombre de *segunda cuantización*. En este método se plantea una tercera representación de la función de onda, denominada como *energética* (De Llano, 1996). Se dice (De Llano, 1996) que uno de los objetivos de Landau fue encontrar la transformación de coordenadas apropiada de un sistema de muchos cuerpos con interacción fuerte a un sistema de partículas que no interactuaran entre si o lo hicieran en forma muy débil. Esta

transformación se encuentra sólo en pocas ocasiones. Por tratarse de sistemas cuánticos, se deben de tener transformaciones que preserven las relaciones de conmutación; estas transformaciones son llamadas transformaciones canónicas. Además es importante señalar que en el análisis de los cristales, siempre se debe utilizar el mayor número de simetrías existentes.

Empezaremos por considerar el problema de una partícula en un potencial del tipo armónico para estudiar en la representación energética las vibraciones de un átomo, cuyo Hamiltoniano viene dado como:

$$H = \frac{\dot{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad \dots(11)$$

que al introducir la relación de conmutación  $[p, x] = \hbar/i$ , se puede factorizar como:

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m} [(ip + m\omega x)(-ip + m\omega x) - m\omega\hbar] \\ &= \frac{1}{2m} [(-ip + m\omega x)(ip + m\omega x) + m\omega\hbar] \end{aligned} \quad \dots(12)$$

La ecuación de Schrödinger  $H|E\rangle = E|E\rangle$  para este hamiltoniano puede escribirse como:

$$H(\pm ip + m\omega x)|E\rangle = (E \mp \hbar\omega)(\pm ip + m\omega x)|E\rangle \quad \dots(13)$$

la cual nos dice que el estado  $(\pm ip + m\omega x)|E\rangle$  es un estado propio de H con valor propio  $(E \mp \hbar\omega)$ . Esto es, la energía E se ha incrementado o disminuido en  $\hbar\omega$ , de aquí que se definan los operadores de ascenso y descenso.

$$\begin{aligned} a &\equiv \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(ip + m\omega x) \\ a^+ &\equiv \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(-ip + m\omega x) \end{aligned} \quad \dots(14)$$

en donde a y  $a^+$  satisfacen  $[a, a^+] = 1$ .

en donde  $a$  y  $a^+$  satisfacen  $[a, a^+] = 1$ .

Con (14), el hamiltoniano queda expresado como:

$$H = (a^+a + \frac{1}{2})\hbar\omega = (aa^+ - \frac{1}{2})\hbar\omega \quad \dots(15)$$

y se deduce que:

$$\Rightarrow E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega, \text{ y que:}$$

$$\Rightarrow E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega \quad \dots(16)$$

También al sumar los operadores de ascenso y descenso o restarlos, se obtiene:

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a^+ + a) \quad \dots(17)$$

$$p = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(a^+ - a)$$

La evolución temporal puede ser estudiada en el esquema de Heisenberg (ver Sakurai, 1996 pág. 82). Donde  $x$ ,  $p$ ,  $a$  y  $a^+$  son todas dependientes del tiempo. Las ecuaciones de Heisenberg son entonces:

$$\frac{dp}{dt} = -m\omega^2 x \quad \dots(18)$$

$$\frac{dx}{dt} = \frac{p}{m}$$

formando un conjunto de dos ecuaciones diferenciales acopladas, que al desacoplarlas:

$$\frac{da}{dt} = -i\omega a \quad \dots(19)$$

$$\frac{da^+}{dt} = i\omega a^+$$

cuyas soluciones son:

$$a(t) = a(0)e^{-i\omega t} \quad \dots(20)$$

$$a^+(t) = a^+(0)e^{i\omega t}$$

que en términos de  $x$  y  $p$ :

$$\Rightarrow \begin{cases} x(t) + \frac{ip(t)}{m\omega} = x(0)e^{-i\omega t} + i\left[\frac{p(0)}{m\omega}\right]e^{-i\omega t} \\ x(t) - \frac{ip(t)}{m\omega} = x(0)e^{i\omega t} - i\left[\frac{p(0)}{m\omega}\right]e^{i\omega t} \end{cases} \dots(21)$$

$$\Rightarrow \begin{cases} x(t) = x(0)\cos(\omega t) + \left[\frac{p(0)}{m\omega}\right]\sin(\omega t) \\ p(t) = -m\omega x(0)\sin(\omega t) + p(0)\cos(\omega t), \end{cases}$$

las cuales tienen la misma forma que en el caso de cualesquiera de las representaciones espacial y de momento. Además que los operadores  $x$  y  $p$  oscilan justo como su análogo clásico.

Para el caso de dos átomos, la teoría de oscilaciones pequeñas nos da la transformación de coordenadas normales (ver Patterson, 1971; pág. 43) que reduce el problema de dos átomos al problema de dos osciladores armónicos desacoplados. Ahora vamos a generalizar (De Llano, 1996) al caso de una cadena lineal cuántica donde los átomos tienen fuerzas conservadoras del tipo de Hooke, es decir, potenciales del tipo oscilador armónico. Sean  $N$  masas y cargas puntuales, cuyo centros de equilibrio ocupan los lugares  $n = 0, a, 2a, \dots, Na \equiv L$ , el Hamiltoniano asociado es:

$$H \approx \frac{1}{2m} \sum_{n=0}^{Na} p_n^2 + \frac{\gamma}{2} \sum_{n=0}^{Na} (x_n - x_{n+a})^2 \dots(22)$$

tal que cumpla la regla de cuantización  $[p_n, x_n] = \hbar/i$  y las condiciones a la frontera  $x_n = x_{n+Na}$ .

Al definir:

$$X_k \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n e^{ikn} x_n$$

$$P_k \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n e^{-ikn} p_n \dots(23)$$

El Hamiltoniano se puede reescribir (De Llano, 1996 pág. 62):

$$H = \frac{1}{2} \sum_k \left\{ \frac{1}{m} P_k^+ P_k + G(k) X_k^+ X_k \right\} \quad \dots(24)$$

en donde  $G(k) \equiv 2\gamma(1 - \cos(ka)) \equiv m\omega_k^2$  y  $\omega_k$  es la frecuencia. Por su dependencia en  $k$ , genera la relación de dispersión. Ahora también se definen los operadores:

$$\begin{aligned} a_k &\equiv \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega_k}} \left\{ P_k - im\omega_k X_k^+ \right\} \\ a_k^+ &\equiv \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega_k}} \left\{ P_k^+ + im\omega_k X_k \right\} \end{aligned} \quad \dots(25)$$

con lo que el Hamiltoniano se reduce (ver Cohen et al., 1977 pág. 589; De Llano, 1996 pág. 63):

$$H = \sum_k \left( a_k^+ a_k + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_k \quad \dots(26)$$

el cual es explícitamente la generalización del Hamiltoniano de la ecuación (15) para  $n$  osciladores armónicos cuánticos desacoplados, correspondientes al sistema de  $n$  partículas con interacción.

En el caso de las redes formadas por dos tipos de átomos, ocurren dos tipos de modos, los llamados acústicos, donde los átomos adyacentes vibran casi en fase y los modos ópticos, donde los átomos adyacentes vibran fuera de fase (Patterson, 1971). En tres dimensiones, como son los cristales reales, también se tienen modos transversales y longitudinales. Al incrementarse el número de partículas, de tal forma que  $N \rightarrow \infty$  y cambiar una de las masas de forma isotópica, este procedimiento se dificulta pues la masa imperfección debe ser tratada como una perturbación, la cual se desarrolla a orden infinito. Este problema ha sido estudiado a través del planteamiento de las ecuaciones de Dyson (ver Taylor, 1970; pág. 284), que son una generalización para el problema de muchos cuerpos. Estas ecuaciones se resuelven usando la técnica matemática de la función de Green, pero su solución puede llegar a ser muy complicada. Se conocen en la literatura unos cuantos casos en los que el problema ha sido resuelto en forma

analítica (Taylor, 1970; Patterson, 1971). Hay otros caminos que han desarrollado métodos muy variados para resolver este problema usando la función de Green, la matriz S, la matriz T, etc. (ver un resumen de estos métodos en Andrade L., 1989 ). Es aquí donde un método alternativo llamado de diferencia finita se plantea como la opción para resolver en forma analítica y cerrada estos problemas de muchos cuerpos (Andrade L., 1989 ; Andrade L., 1981; Andrade L., 1977<sup>a</sup>). Éste es el método que usaremos en lo que sigue en este trabajo.

## 1.2 El cristal tipo zinc - blenda.

Por la simetría que presentan los cristales que en este trabajo se tratarán, fosforo de galio y arsenuro de aluminio, se considera el eje de alta simetría (fig. 2) correspondiente a la dirección denotada como  $(\xi, \xi, \xi)$ , pues estos cristales presentan una geometría del tipo Zinc - Blenda, en la cual supondremos que los planos de vibración están desacoplados. De acuerdo a los argumentos y las suposiciones de la sección anterior, es válido representar al cristal perfecto tipo Zinc - Blenda en la dirección  $(\xi, \xi, \xi)$ , como una red diatómica lineal infinita formada por masas puntuales con interacciones a primeros vecinos (fig. 2, línea punteada).

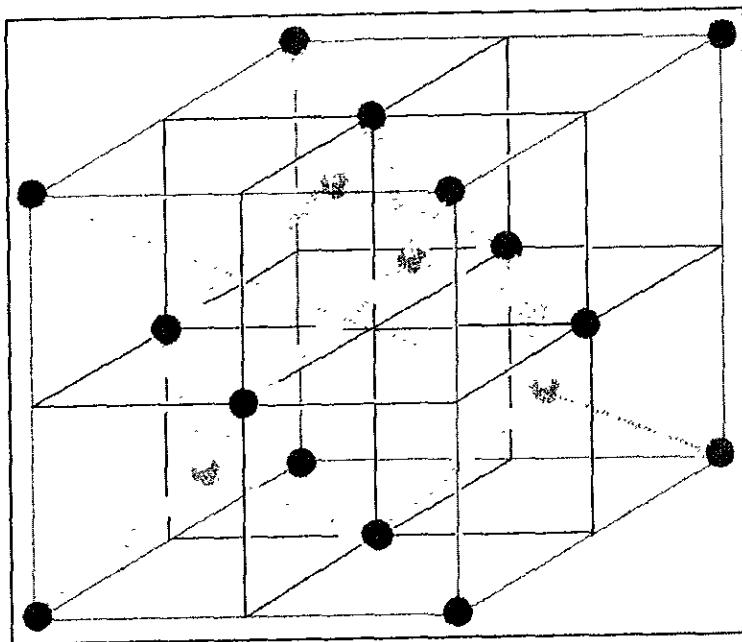


Fig. 2 Celda unitaria de un cristal tipo Zinc - blenda, mostrando el eje  $(\xi, \xi, \xi)$  en línea punteada verde (Cohen et. al., 1982, pág. 66).

### 1.3 Resultados experimentales para el fosforo de galio limpio y con imperfección de boro y el arsenuro de aluminio limpio y con imperfección de carbón.

Experimentalmente se miden las frecuencias de vibración de las redes cristalinas y se obtienen las llamadas curvas de dispersión, las cuales dan las ramas de frecuencias permitidas para cada cristal en todas las direcciones de simetría. Hay que notar que en nuestro modelo teórico de red cristalina, los valores extremos a lo largo de algunos ejes de simetría delimitan las ramas óptica y acústica (tablas I y II). Esto no sucede en las medidas experimentales debido al hecho de que los cristales reales son sistemas mucho más complicados del modelo que nosotros estamos usando para representar los fonones. En las curvas de dispersión no es posible encontrar los fonones localizados, pues éstos se presentan en un cristal con imperfección y se puede decir entonces que tienen un número de onda imaginario. Como antes mencionamos los fonones son localizados de manera que aquí se presenta una gráfica de  $\omega$  en la que se superponen los valores de los fonones localizados para el fosforo de galio con boro (fig. 3) y para el arsenuro de aluminio (fig. 4) con los valores extremos también a lo largo del eje  $(\xi, \xi, \xi)$ . En estas gráficas y en las tablas I y II se muestran los valores correspondientes a las orillas de las bandas en el punto  $\Gamma$  y en el punto L, a lo largo del eje de simetría  $(\xi, \xi, \xi)$ . En la Tabla I se observan también los valores extremos a lo largo del eje de simetría  $(\xi, 0, 0)$  para el GaP. Note que en la tabla II se tienen medidas hechas con fotoluminiscencia.



Fig. 3. Espectro de Frecuencias del Fosforo de Galio con Boro.

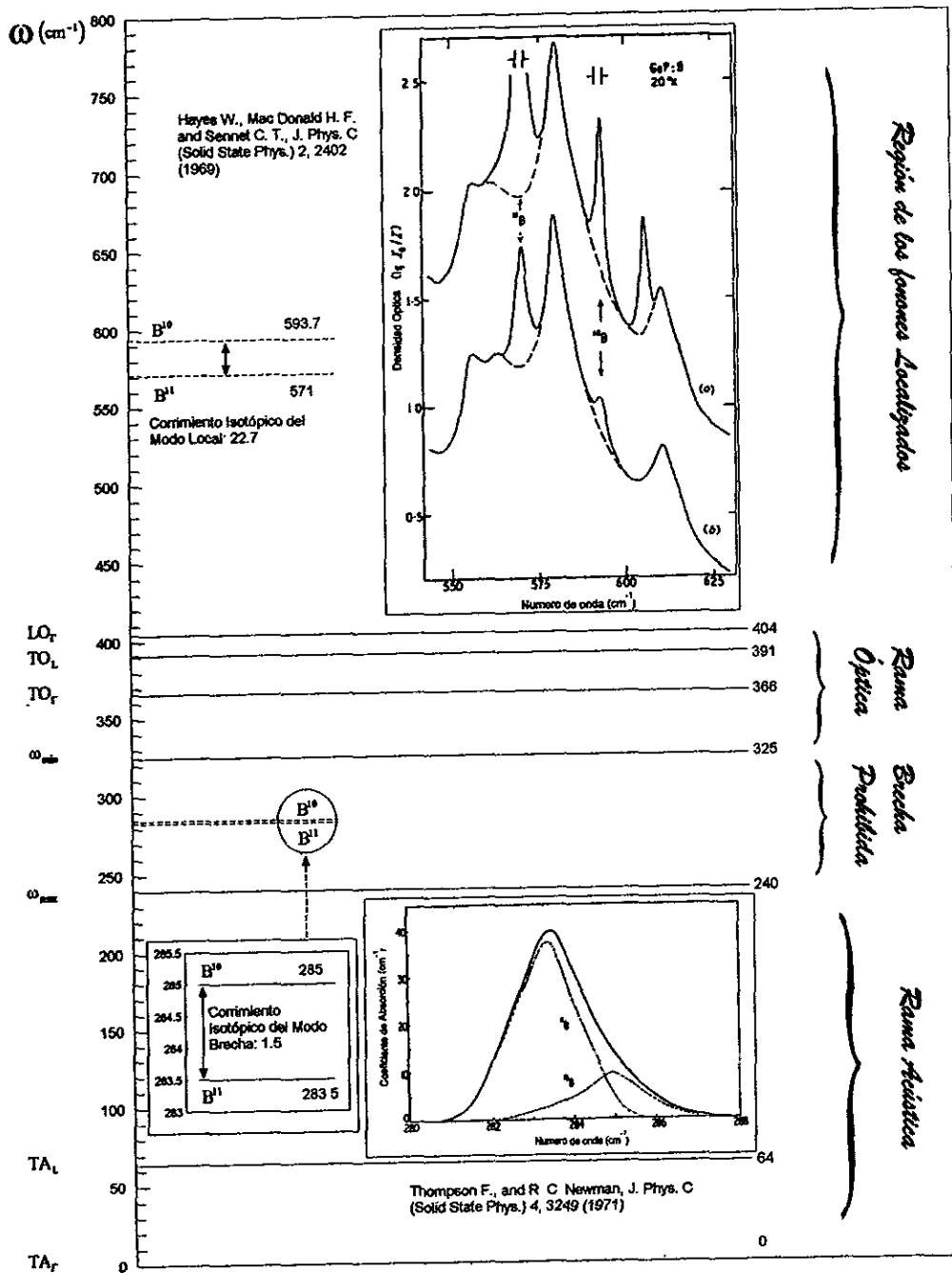
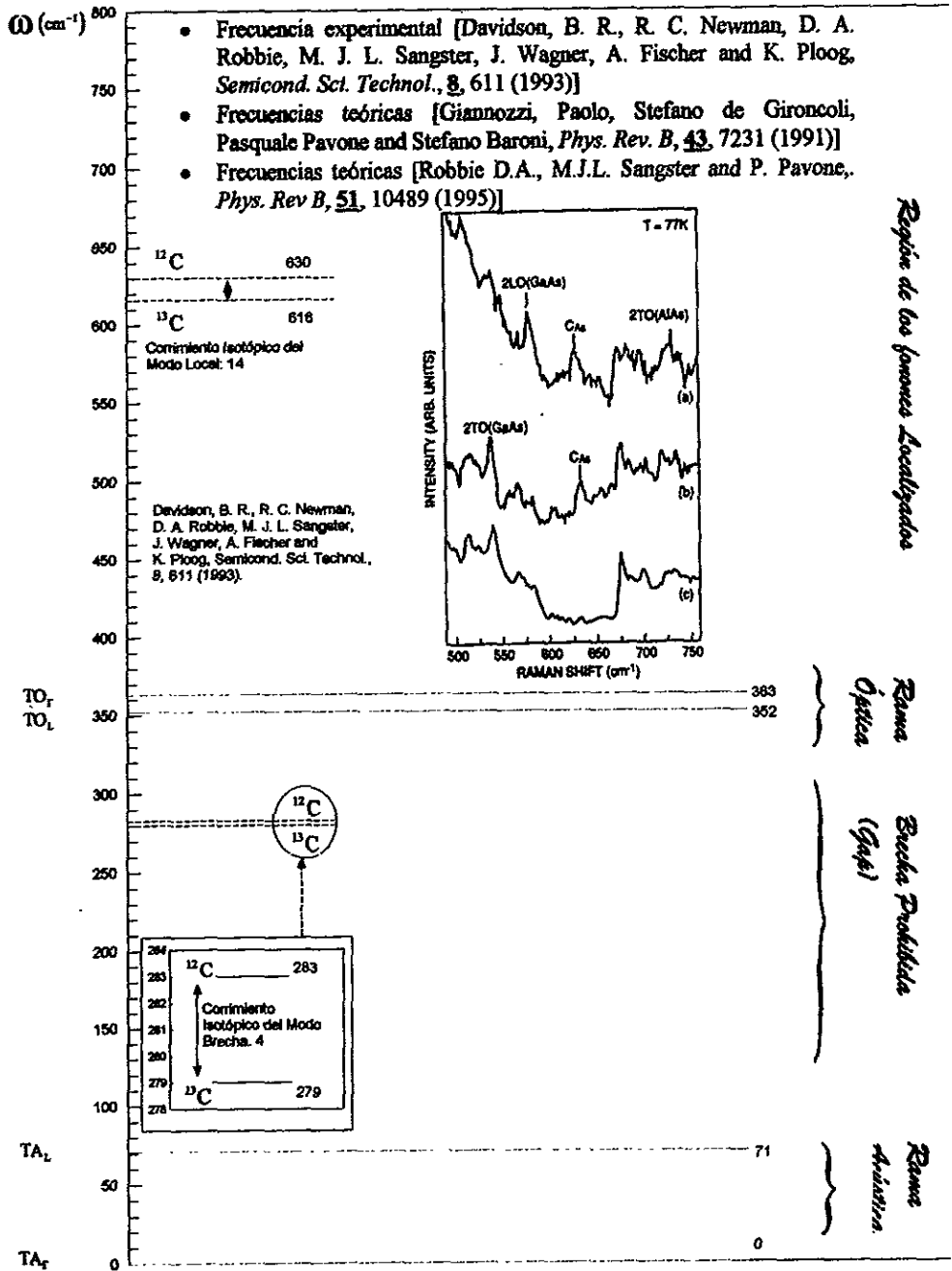


Fig. 4. Espectro de Frecuencias del Arsenuro de Aluminio con Carbón.



### TABLA I

Frecuencias de los fonones para las orillas de las bandas del GaP

Brecha de los fonones	INFRARROJO				RAMAN	NEUTRONES
	$\Gamma$	(300 °K) L	X	(4 °K) X	(300 °K) L	
TA	0	64	103	106	0	-
LA	0	212	172	254	0	-
$\omega_{max}$	-	-	-	-	-	325
$\omega_{min}$	-	-	-	-	-	340
TO	366	391	379	368	365.3 ± 0.5	-
LO	404	368	358	-	402.5 ± 0.5	-
	Hobden M. V. and Russell J. P. Phys. Lett. 13, 39 (1964)		Dean P. J. Phys. Rev. 157, 855 (1967)		Barker, Jr., A. S. Yamell et. al. 1968 Phys. Rev. 165, 917 (1968)	
	Russell J. P. J. Phys. (Paris) 26, 629 (1965)					

### TABLA II

Frecuencias de los fonones para las orillas de las bandas del AlAs.

Brecha de los fonones	Cálculo ab initio	
	$\Gamma$	L
TA	0	71
LA	0	212
TO	363	352
	Gionnozzi P. et al, (1991).	

Para el caso del arsenuro de aluminio no ha sido posible el crecer cristales de dimensiones del orden de centímetros cúbicos necesarios para poder realizar la espectroscopía infrarroja, sólo se disponen de películas delgadas. Sin embargo, la espectroscopía Raman puede proporcionar el valor de la frecuencia de los fonones producidos por la sustitución de un átomo de arsénico por uno de carbono. Esto se muestra en la figura 4. La frecuencia del modo local es de  $630\text{cm}^{-1}$ .

En nuestro caso es suficiente la información que proporciona la espectroscopía fotoluminiscente para el cristal perfecto porque se obtienen las frecuencias de las orillas de las bandas en los puntos  $\Gamma$  y L. En la literatura los espectros se encuentran reportados en términos de la energía en unidades de [eV], aquí los mostramos en unidades de número de onda [ $\text{cm}^{-1}$ ] (ver tabla II).

#### 1.4 Resultados obtenidos con el modelo de masas.

##### a) El cristal perfecto.

En la sección 1.2, se discutió la forma en la cual un cristal tipo zinc - blenda se puede representar como un conjunto de redes lineales infinitas formadas por masas y cargas puntuales con interacciones a primeros vecinos. Al considerar el eje de simetría  $(\xi, \xi, \xi)$ , resulta un arreglo regular que da lugar al *modelo de cristal perfecto*, que consiste de una cadena lineal con dos masas puntuales  $m$  y  $M$ . Los potenciales efectivos de interacción atómica con los cuales quedan unidas las masas, se suponen tales que cumplen con la aproximación Born - Oppenheimer, permitiendo la correspondencia del oscilador armónico. Así que los potenciales interatómicos efectivos se representarán como las constantes  $k$  y  $\kappa$  (fig. 5). Los desplazamientos de los átomos con respecto a su posición de

equilibrio se denotan por  $x_n$  y  $y_n$ , con  $n$  el lugar de la red.

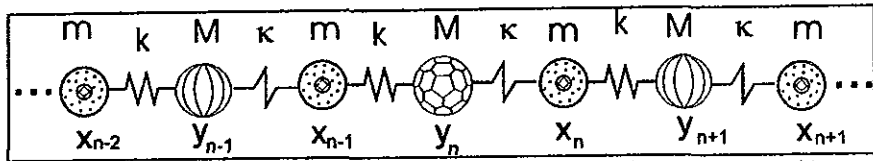


Fig. 5. Red lineal diatómica con dos masas y dos potenciales de interacción.

Este problema fue resuelto por primera vez utilizando el método de las ecuaciones de diferencias finitas (Andrade L., 1987). Alguno de los resultados obtenidos en ese trabajo los mostramos enseguida:

La relación de dispersión en este caso para la red perfecta es:

$$\omega^2 = \frac{k}{2M} \left( (1+\rho)(1+\varepsilon) \pm \sqrt{(1+\rho)^2(1+\varepsilon)^2 - 16\rho\varepsilon \sin^2(\theta)} \right) \dots(27)$$

donde:  $\rho = \frac{\kappa}{k}$  y  $\varepsilon = \frac{M}{m}$ .

La ecuación (27) forma las ramas denominadas como *acústica* y *óptica* (figura 6).

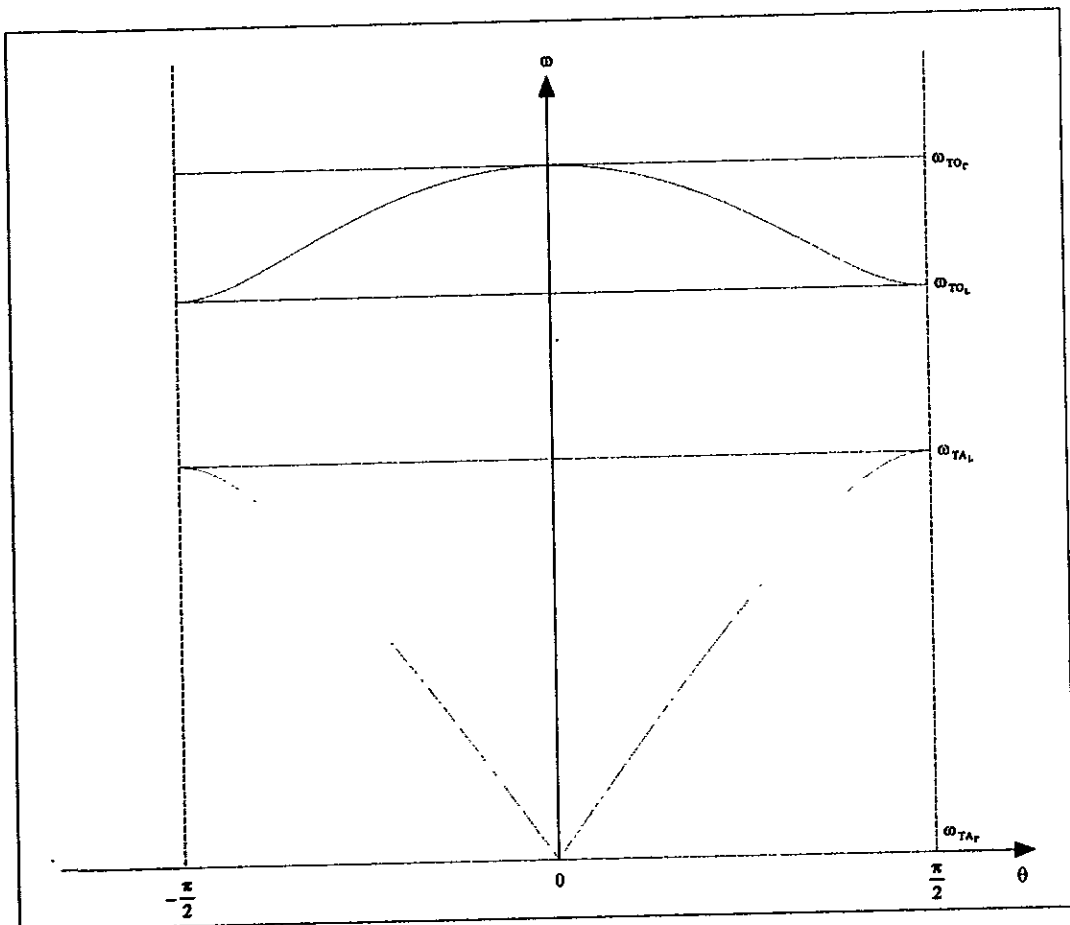


Fig. 6. Frecuencias de oscilación en función del número de onda para la red diatómica anterior.

Esto permite definir los valores extremales  $\omega_{TOc}$  y  $\omega_{TAr}$  cuando  $\theta=0$ , y  $\omega_{TOl}$  y  $\omega_{TAl}$  cuando  $\theta = \frac{\pi}{2}$ :

También en ese trabajo se calculan las orillas de las ramas en términos de los parámetros del sistema y se obtienen los siguientes valores:

$$\omega_{TO_r}^2 = (k + \kappa) \left( \frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right) \quad \dots(28)$$

$$\omega_{TO_L}^2 = \frac{k}{2M} \left( (1+\rho)(1+\varepsilon) + \sqrt{(1+\rho)^2(1+\varepsilon)^2 - 16\rho\varepsilon} \right) \quad \dots(29)$$

$$\omega_{TA_L}^2 = \frac{k}{2M} \left( (1+\rho)(1+\varepsilon) - \sqrt{(1+\rho)^2(1+\varepsilon)^2 - 16\rho\varepsilon} \right) \quad \dots(30)$$

$$\omega_{TA_r}^2 = 0 \quad \dots(31)$$

b) El modelo de masa imperfección.

El primer modelo de imperfección (fig. 7) que se utilizó para estudiar el efecto que un átomo diferente produce en las frecuencias y las formas de las vibraciones en esta red fue resuelto (Andrade L., 1987; Andrade L., y Cruz Irisson M., 1988; Cruz Irisson M., 1990) como un problema de valor característico siguiendo el método de las ecuaciones de diferencia finita (Andrade L., 1989; Andrade L., 1981; Andrade L., 1977<sup>a</sup>).

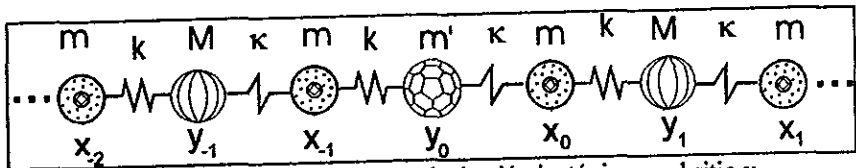


Fig. 7. Red diatómica con una sustitución isotópica en el sitio  $y_0$ .

La ecuación de valores propios para las frecuencias en términos de los parámetros del sistema obtenida en estos trabajos es la siguiente:

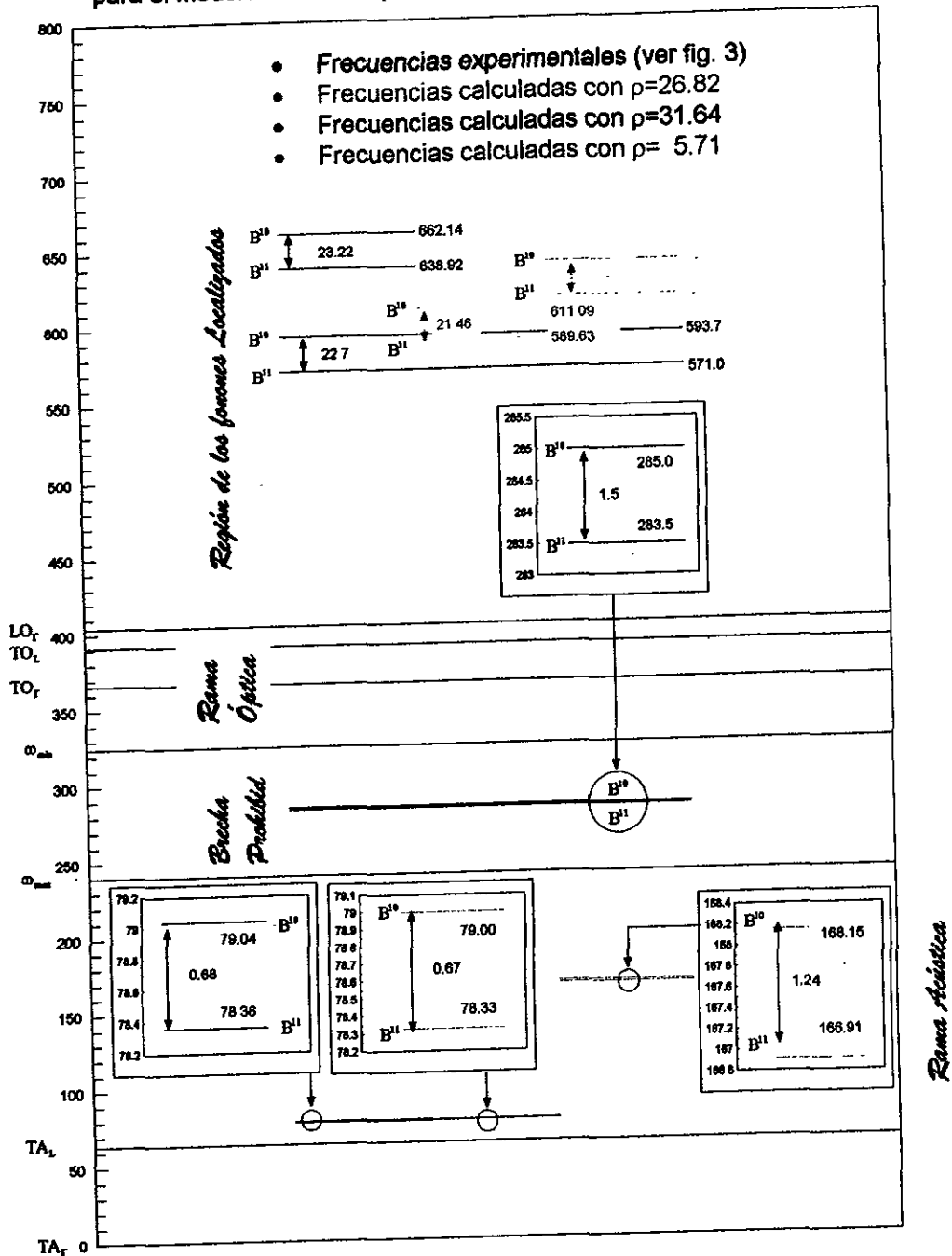
$$\begin{aligned} & [\varepsilon_1(\varepsilon_1 - 2\varepsilon)]\chi^3 + [2(\rho+1)(\varepsilon_1(2\varepsilon - \varepsilon_1) + \varepsilon)]\chi^2 + \\ & [(\rho+1)^2(\varepsilon_1+1)(\varepsilon_1 - 2\varepsilon - 1)]\chi + 4\rho(\rho+1)(\varepsilon+1) = 0 \end{aligned} \quad \dots(32)$$

en donde  $\varepsilon_1 = \frac{m'}{m}$  y  $\chi = \frac{m\omega^2}{k}$ .

Este modelo de imperfección se aplicó también (Andrade L. Miranda G. y Herrera E., 1995) para calcular las frecuencias y los corrimientos isotópicos de ellas además de las formas de los modos normales de vibración localizados en el fosforo de galio con impurezas de boro. En la ecuación (32) se considera que  $M$  corresponde a la masa atómica del Galio,  $m$  a la del fósforo y  $m'$  a la del Boro, tanto en su isótopo  $^{10}\text{B}$  como  $^{11}\text{B}$ . Se evalúan los parámetros (ver sección II.3) de la red para que al resolver la ecuación de valores propios en  $\chi$  se obtengan las frecuencias de los modos localizados y con éstos, los corrimientos isotópicos. Los resultados obtenidos en el trabajo mencionado antes se representan en la figura 8, tanto para los modos locales como para los modos de brecha. De los resultados obtenidos en este trabajo observamos uno cualitativo muy interesante pues se obtienen los dos fonones localizados, tanto el local como el brecha. La frecuencia del fonón local es cercana al valor experimental, sin embargo, la frecuencia para el fonón brecha está muy alejada del resultado medido (ver fig. 3 y fig. 8). Los corrimientos isotópicos están de acuerdo con el experimento. Sin embargo, es conocido en la literatura que un modelo de masas no permite calcular las frecuencias para los fonones localizados que estén de acuerdo con el experimento. Por ello es necesario cambiar las fuerzas interatómicas alrededor de la impureza, esto último será el motivo del siguiente capítulo.



Fig. 8. Espectro de Frecuencias del Fosforo de Galio (GaP) con Boro (B)  $\omega$  ( $\text{cm}^{-1}$ ) para el modelo de masas (Andrade L. Miranda G. y Herrera E., 1995).



## Capítulo II

### El modelo de Imperfeccion

En este capítulo se presenta, en su primera parte, un resumen de las frecuencias de los fonones localizados tanto en el cristal perfecto como del cristal con impurezas. Incluimos el caso del fosfuro de galio con boro y del arsenuro de aluminio con carbon. También incluimos un breve resumen con resultados de las diferentes teorías usadas para calcular estas frecuencias de los fonones localizados. En la segunda parte detallamos el cálculo de este mismo problema, pero ahora usando el método de las ecuaciones de diferencia finita y después lo aplicamos al boro en fosfuro de galio y al carbon en arsenuro de aluminio.

#### 2.1.a Mediciones experimentales en el cristal perfecto (fosfuro de galio).

Las mediciones de las vibraciones del fosfuro de galio comienzan con Hobden y Russell en 1964 (Hobden M. V. and Russell, 1964). Estos autores utilizando espectroscopia infrarroja, con un láser de helio - neon de longitud de onda  $6328\text{\AA}$  para este semiconductor de las columnas III-V de la tabla periodica a una temperatura de  $300\text{ }^\circ\text{K}$ , encuentran que las frecuencias de las orillas de las bandas para el fosfuro de galio son:  $\text{TO}_\Gamma = 366\text{ cm}^{-1}$ ,  $\text{LO}_\Gamma = 404\text{ cm}^{-1}$ ,  $\text{TO}_\text{L} = 391\text{ cm}^{-1}$ ,  $\text{LO}_\text{L} = 368\text{ cm}^{-1}$ ,  $\text{LA}_\text{L} = 212\text{ cm}^{-1}$ ,  $\text{TA}_\text{L} = 64\text{ cm}^{-1}$ ,  $\text{TO}_\text{X} = 379\text{ cm}^{-1}$ ,  $\text{LO}_\text{X} = 358\text{ cm}^{-1}$ ,  $\text{LA}_\text{X} = 172\text{ cm}^{-1}$ ,  $\text{TA}_\text{X} = 103\text{ cm}^{-1}$ . En 1967, Dean (Dean, P. J., 1967) también utiliza la espectroscopia infrarroja con cristales de aproximadamente un milímetro de espesor a una temperatura de  $4\text{ }^\circ\text{K}$ , obteniendo para este cristal las orillas de las bandas:  $\text{TO}_\text{X} = 366\text{ cm}^{-1}$ ,  $\text{LA}_\text{X} = 254\text{ cm}^{-1}$ ,  $\text{TA}_\text{X} = 106\text{ cm}^{-1}$ . Hay que

hacer notar que medidas a diferente temperatura tienen un corrimiento pequeño de las frecuencias. Barker mide en 1968 (Barker, A. S. Jr., 1968), ahora con la espectroscopía Raman y un láser de helio - neon a 300 °K, las orillas de las bandas en la dirección L, obteniendo:  $TO_L = 365.3 \pm 0.5 \text{ cm}^{-1}$ ,  $LO_L = 402.5 \pm 0.5 \text{ cm}^{-1}$ ,  $TA_L = 0 \text{ cm}^{-1}$ ,  $LA_L = 0 \text{ cm}^{-1}$ . Finalmente en 1968, Yarnell et al. (Yarnell, J. L., J. L. Warren, R. G. Wenzel and P. J. Dean, 1968) realizan mediciones con neutrones de baja energía, con lo cual determinan cuales son las frecuencias que acotan tanto a la banda óptica, como a la acústica, sin importar la dirección de simetría. Estas frecuencias son  $\omega_{\min} = 340 \text{ cm}^{-1}$  y  $\omega_{\max} = 325 \text{ cm}^{-1}$ , respectivamente. Sin embargo, aun teniendo esta gama de resultados para las orillas de las bandas del cristal perfecto, no existe al momento un experimento que incorpore todas las direcciones de simetría, así como todas las técnicas de espectroscopía.

#### 2.1.b Mediciones experimentales en el cristal con impurezas (fosforo de galio):

La medición de modos vibracionales debido a boro en fosforo de galio comienza con Spitzer et al. en 1969 (Spitzer W.G., Allred W., Blum S. E. and Chicotka R. J., 1969), quienes usan espectroscopía infrarroja y encuentran que en  $592 \text{ cm}^{-1}$  y  $569 \text{ cm}^{-1}$  se localizan los picos de las frecuencias de los fonones locales debido al boro. Como las líneas guardan una proporción de intensidades relativas de 4:1, hacen la suposición de la abundancia isotópica natural del  $^{10}\text{B}$  al  $^{11}\text{B}$ , y concluyen así que la frecuencia  $592 \text{ cm}^{-1}$  corresponde al  $^{10}\text{B}$  y la  $569 \text{ cm}^{-1}$  al  $^{11}\text{B}$ . En ese año, Hayes et al. (Hayes W., Mac Donald H. F. and Sennet C. T., 1969), interesados por las alteraciones de las propiedades electroluminiscentes debido a impurezas y a la emisión de luz, utilizan la espectroscopía infrarroja a una temperatura de 20 °K y encuentran que los modos locales tienen picos en  $593.4 \text{ cm}^{-1}$  para el  $^{10}\text{B}$  y  $571 \text{ cm}^{-1}$  para el  $^{11}\text{B}$ . Por la forma de crecimiento del cristal encuentran las frecuencias de los fonones brecha en  $293.8 \text{ cm}^{-1}$  para el  $^{10}\text{B}$  y  $284.2 \text{ cm}^{-1}$  para el  $^{11}\text{B}$ , también con espectroscopía infrarroja. Además

proponen la existencia de la combinación lineal de los fonones local y brecha para explicar las líneas de  $882.4 \text{ cm}^{-1}$  para el  $^{10}\text{B}$  y  $849 \text{ cm}^{-1}$  para el  $^{11}\text{B}$ . Thompson y Newman, en 1971 (Thompson F., and R. C. Newman, 1971) realizan experimentos más finos con espectroscopía infrarroja a  $77 \text{ °K}$  de temperatura y encuentran una línea asimétrica que al desdoblarla en dos distribuciones de Lorentz, da los picos del  $^{10}\text{B}$  y del  $^{11}\text{B}$  para los fonones de brecha. Además encuentran la relación de intensidad con la que muestran que al aumentar las proporciones de uno de los isótopos del boro también aumentan linealmente las intensidades de los picos tanto de los fonones locales como los fonones brecha. Obtienen que las frecuencias son  $593.7 \text{ cm}^{-1}$  para el  $^{10}\text{B}$  y  $571.0 \text{ cm}^{-1}$  para  $^{11}\text{B}$  en el caso de los fonones locales y en los modos brecha  $285.0 \text{ cm}^{-1}$  para el  $^{10}\text{B}$  y  $283.5 \text{ cm}^{-1}$  para el  $^{11}\text{B}$ . En la figura 9 se presentan los valores usados en este trabajo.

#### 2.1.c Mediciones experimentales en el cristal perfecto (arsenuro de aluminio):

En 1973, Monemar (Monemar B., 1973) realiza la medición de espectros de excitación con fotoluminiscencia, por la dificultad de obtener información de materiales donde las muestras para mediciones por transmisión no pueden aún ser preparadas, obteniendo para este cristal las orillas de las bandas:  $\text{TO}_\Gamma = 361 \text{ cm}^{-1}$ ,  $\text{LO}_\Gamma = 402 \text{ cm}^{-1}$ ,  $\text{TO}_\text{X} = 333 \text{ cm}^{-1}$ ,  $\text{LO}_\text{X} = 399 \text{ cm}^{-1}$ ,  $\text{LA}_\text{X} = 219 \text{ cm}^{-1}$ ,  $\text{TA}_\text{X} = 109 \text{ cm}^{-1}$ .

#### 2.1.d Mediciones experimentales en el cristal con impurezas (arsenuro de aluminio):

Davidson et al., en 1993 (Davidson, B. R., R. C. Newman, D. A. Robbie, M. J. L. Sangster, J. Wagner, A. Fischer and K. Ploog, 1993) hacen mediciones de absorción infrarroja del cristal altamente contaminado con carbono. Obtienen que la frecuencia del fonón local para el  $^{12}\text{C}$  es  $630.0 \text{ cm}^{-1}$ .

## 2.1.e Modelos teóricos en el cristal limpio y con impurezas:

Después de realizar los experimentos Hayes et al. en 1969 (Hayes W., Mac Donald H. F. and Sennet C. T., 1969), se plantearon el objetivo de tratar de calcular las frecuencias de los fonones suponiendo que no hay cambios en las constantes de fuerza (modelo de masas), usando una teoría en la que las posiciones de las frecuencias de los modos del boro dependen básicamente de la distribución de frecuencias de los modos normales de vibración de la red perfecta. La densidad de modos se representa por combinaciones de las distribuciones de Einstein y Debye con lo que calculan que los modos local son  $660.7 \text{ cm}^{-1}$  para el  $^{10}\text{B}$  y  $635.3 \text{ cm}^{-1}$  para el  $^{11}\text{B}$  y los modos brecha son  $244.9 \text{ cm}^{-1}$  para el  $^{10}\text{B}$  y  $244.6 \text{ cm}^{-1}$  para el  $^{11}\text{B}$ . En 1971, Gaur et al. (Gaur S. P., Vetelino J. F. and Mitra S. S., 1971), utilizan la técnica de la función de Green en la aproximación del defecto de masa para calcular la dinámica de la red del cristal imperfecto. Este modelo utiliza las frecuencias propias y amplitudes propias de vibración de los fonones en la red cristalina perfecta y hace la suposición que el único cambio significativo introducido en la red perfecta por la impureza sustitucional es el cambio de masa, obteniendo las frecuencias  $636.6 \text{ cm}^{-1}$  para el  $^{10}\text{B}$  y  $611.6 \text{ cm}^{-1}$  para el  $^{11}\text{B}$  y en los modos brecha  $289.2 \text{ cm}^{-1}$  para el  $^{10}\text{B}$  y  $287.9 \text{ cm}^{-1}$  para el  $^{11}\text{B}$ . Más adelante, Singh y Mitra en 1972 (Singh R. S. and Mitra S. S., 1972) desarrollan un modelo molecular para el problema del defecto puntual al tratar de explicar las frecuencias de los modos local y brecha producidas por las impurezas sustitucional. En este modelo suponen que el problema del cristal con defecto se puede expresar en términos de excitaciones elementales sin perturbar. Así que consideran una red con una masa defecto sustitucional como perturbación del espectro fonónico. Utilizan la simetría zinc - blenda en la cual consideran que el átomo impureza se encuentra en una concentración diluida, tal que no interactúe con otro átomo impureza. lo resuelven utilizando la función de Green, obteniendo

las frecuencias  $610.7 \text{ cm}^{-1}$  para el  $^{10}\text{B}$  y  $588.2 \text{ cm}^{-1}$  para el  $^{11}\text{B}$  y en los modos brecha  $319.7 \text{ cm}^{-1}$  para el  $^{10}\text{B}$  y el  $^{11}\text{B}$ . En 1973, Jain et al. (Jain K. P. and Prabhakaran, 1973) calculan las frecuencias de los modos locales del boro. Sus resultados son similares a los cálculos teóricos previos, pero difieren considerablemente con las frecuencias experimentales. Hay que hacer notar que en este cálculo no obtienen modos brecha. Talwar y Agrawal, en 1974 (Talwar D. N. and Agrawal B. K., 1974) utilizan un modelo de siete parámetros que supone impurezas isoelectronicas, lo resuelven con la técnica de la función de Green. En este modelo se supone que la impureza afecta muy poco el potencial interatómico, utilizan las amplitudes y frecuencias propias de los modos normales del cristal perfecto. Al cual lo representan con dos modelos, uno de seis parámetros denominado como *somero* y otro de cuatro parámetros, denominado como *de ion rígido*. Sin embargo, éste modelo solo fue desarrollado para los modos locales, obteniendo las frecuencias:  $620 \text{ cm}^{-1}$  para el  $^{10}\text{B}$  y  $597 \text{ cm}^{-1}$  para el  $^{11}\text{B}$ . En 1975, nuevamente Talwar y Agrawal (Talwar D. N. and Agrawal B. K., 1975) desarrollan un modelo que incorpora cambios en las constantes de fuerza debido a varias impurezas sustitucionales. Para esto, estudian la dinámica del cristal imperfecto con el método de la función de Green, donde necesitan tener un conocimiento detallado de las frecuencias y de los vectores de polarización de los fonones en el cristal perfecto. En su modelo, suponen despreciables las fuerzas de Coulomb así como las fuerzas iónicas de polarización, de tal forma que simplifican el número de parámetros de siete a cuatro. Con este modelo obtienen las frecuencias de los modos locales  $534 \text{ cm}^{-1}$  para el  $^{10}\text{B}$  y  $515 \text{ cm}^{-1}$  para el  $^{11}\text{B}$ . Sin embargo, tampoco encuentran frecuencias en la brecha. Vandevyver y Plumelle, en 1977 (Vandevyver M. et Plumelle P., 1977), proponen un modelo de iones rígidos de once parámetros con interacción a primeros y segundos vecinos y con interacciones Coulombianas. Este modelo se resuelve con la función de Green suponiendo que la impureza es sustitucional de forma isoelectronic. Las frecuencias que encuentran son solo para los modos locales, pero muestran

algunas contradicciones. En 1978, Vandevyver y Plumelle (Vandevyver M. et Plumelle P., 1978), proponen un modelo que incluye las interacciones ionicas efectivas a primeros y segundos vecinos cercanos, y las interacciones Coulombianas, donde suponen que la impureza substitucional no es isoelectronica. Este modelo se resuelve con la funcion de Green. Obteniendo que los modos locales son  $592.7 \text{ cm}^{-1}$  para el  $^{10}\text{B}$  y  $570 \text{ cm}^{-1}$  para el  $^{11}\text{B}$ . Finalmente en 1984, Shue - Chu Shen (Shue-Chu Shen, 1984) trata de realizar el cálculo de los fonones local y brecha con la técnica de la funcion de Green, sin embargo, solo obtiene los valores para los modos locales  $534 \text{ cm}^{-1}$  para el  $^{10}\text{B}$  y  $515 \text{ cm}^{-1}$  para el  $^{11}\text{B}$  en el modelo de masas.

Para el caso del arsenuro de aluminio, el método de espectroscopía con fotoluminiscencia no proporciona informacion de las orillas de las bandas sobre el eje de simetría  $(0, \xi, \xi)$ , así que en 1991, Giannozzi et al. (Giannozzi, Paolo, Stefano de Gironcoli, Pasquale Pavone and Stefano Baroni, 1991) aprovechan la respuesta lineal de la funcional de densidad para calcular la dinámica de la red perfecta y así completar las curvas de dispersion del arsenuro de aluminio. Obteniendo que las frecuencias son  $\text{TO}_\Gamma = 363 \text{ cm}^{-1}$ ,  $\text{LO}_\Gamma = 400 \text{ cm}^{-1}$ ,  $\text{TO}_\text{L} = 352 \text{ cm}^{-1}$ ,  $\text{LO}_\text{L} = 372 \text{ cm}^{-1}$ ,  $\text{LA}_\text{L} = 212 \text{ cm}^{-1}$ ,  $\text{TA}_\text{L} = 71 \text{ cm}^{-1}$ ,  $\text{TO}_\text{X} = 337 \text{ cm}^{-1}$ ,  $\text{LO}_\text{X} = 393 \text{ cm}^{-1}$ ,  $\text{LA}_\text{X} = 216 \text{ cm}^{-1}$ ,  $\text{TA}_\text{X} = 95 \text{ cm}^{-1}$ . En 1995, Robbie et al. (Robbie D.A., M.J.L. Sangster and P. Pavone, 1995) utilizan los resultados y la técnica de Giannozzi et al. para completar la matriz dinámica para cualquier vector de onda y poderlas adaptar para dar el tensor dieléctrico y la carga efectiva de los átomos. Para resolver, ellos utilizaron el método de la funcion de Green, obteniendo que las frecuencias de los fonones locales son  $630 \text{ cm}^{-1}$  para el  $^{12}\text{C}$  y  $616 \text{ cm}^{-1}$  para el  $^{13}\text{C}$  y en los fonones brecha  $283 \text{ cm}^{-1}$  para el  $^{12}\text{C}$  y  $279 \text{ cm}^{-1}$  para el  $^{13}\text{C}$ .

En este trabajo solo se han considerado aquellos modelos cuyo objetivo

es el cálculo de las frecuencias de los fonones localizados que aparecen de forma simultánea en los cristales de fosforo de galio al implantar una impureza sustitucional de boro por galio y arsenuro de aluminio al substituir un átomo de arsénico por carbon. En estos artículos que tratan los modos localizados se obtienen las soluciones con métodos heurísticos y numéricos (funcion de Green), donde la complejidad de los cálculos lleva a los autores a la realizacion de aproximaciones numéricas muy elaboradas. En la tabla III se presenta la lista de artículos con los valores que obtienen para los modos localizados, de donde se infieren los corrimientos isotopicos.



Fig. 9. Espectro de Frecuencias del Fosforo de Galio (GaP) con Boro (B) para los modelos teoricos publicados.

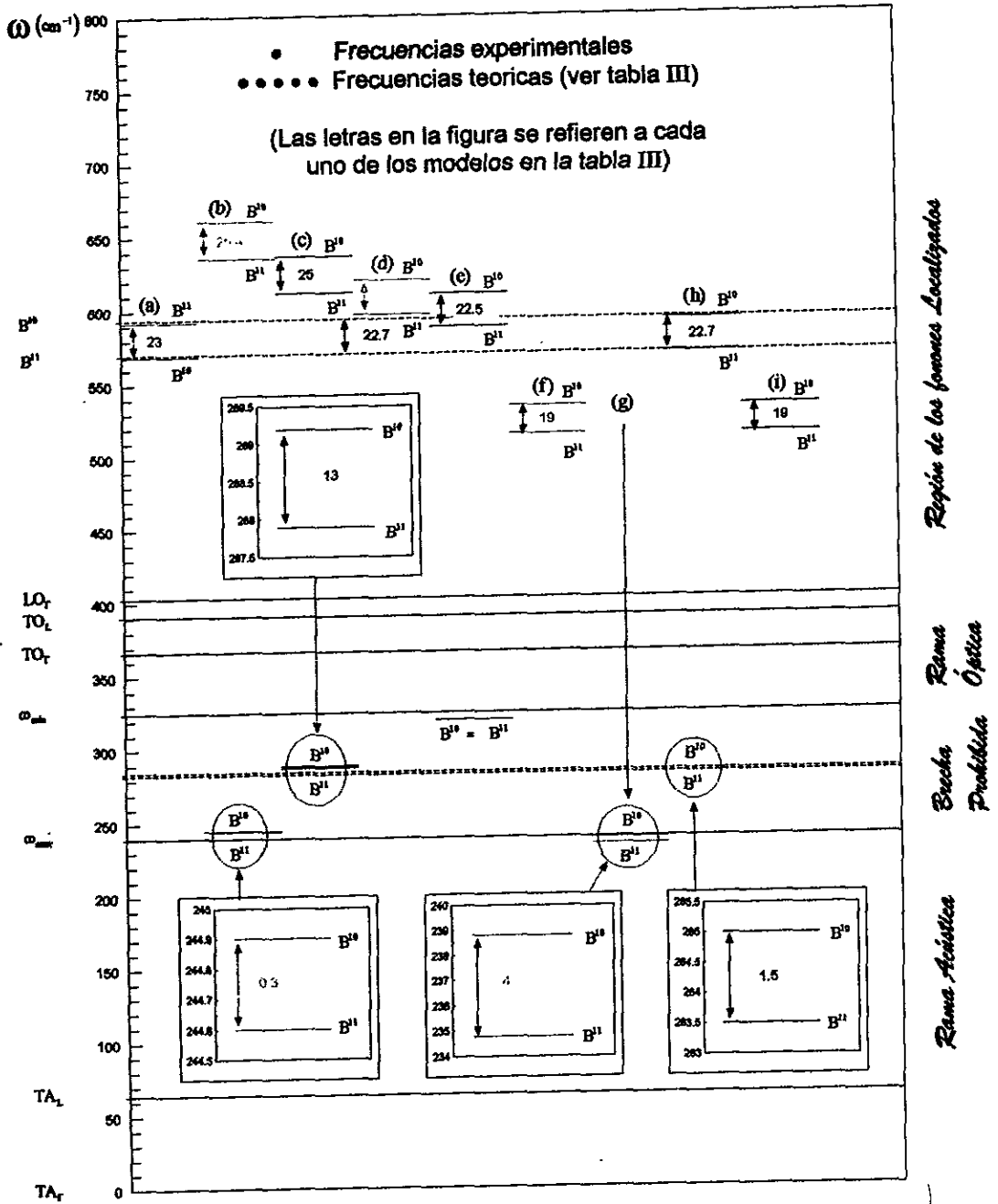


TABLA III. Modelos teóricos utilizados para encontrar los modos localizados del GaP:B (frecuencias en  $\text{cm}^{-1}$ ).

Spitzer W. G., Allred W., Blum S. E. and Chicotka R. J., J. Appl. Phys. <u>40</u> , 2589 (1969)	Local	$^{10}\text{B}$ :592	(a)
		C. I:23	
	Brecha	$^{11}\text{B}$ :569	
		$^{10}\text{B}$ :-	
		C. I:-	
		$^{11}\text{B}$ :-	

Hayes W., Mac Donald H. F. and Sennet C. T., J. Phys. C (Solid State Phys.) <u>2</u> , 2402 (1969)	Local	$^{10}\text{B}$ :660.7	(b)
		C. I:25.4	
	Brecha	$^{11}\text{B}$ :635.3	
		$^{10}\text{B}$ :244.9	
		C. I:0.3	
		$^{11}\text{B}$ :244.6	

Gaur S. P., Vetelino J. F. and Mitra S. S., J. Phys. Chem. Solids, <u>32</u> , 2737 (1971)	Local	$^{10}\text{B}$ :636.6	(c)
		C. I:25	
	Brecha	$^{11}\text{B}$ :611.6	
		$^{10}\text{B}$ :289.2	
		C. I:13	
		$^{11}\text{B}$ :287.9	

TABLA III. Continuación.

Talwar D. N. and  
Agrawal B. K.,  
Phys. Rev., B9,  
2539 (1974)

}	Local	{ <sup>10</sup> B:620	(d)
		C. I:23	
		{ <sup>11</sup> B:597	
}	Brecha	{ <sup>10</sup> B:-	
		C. I:-	
		{ <sup>11</sup> B:-	

Singh R. S. and  
Mitra S. S., Phys.  
Rev., B5, 733  
(1972)

}	Local	{ <sup>10</sup> B:610.7	(e)
		C. I:22.5	
		{ <sup>11</sup> B:588.2	
}	Brecha	{ <sup>10</sup> B:319.7	
		C. I:0	
		{ <sup>11</sup> B:319.7	

Talwar D. N. and  
Agrawal B. K.,  
Phys. Rev., B12,  
1432 (1975)

}	Local	{ <sup>10</sup> B:534	(f)
		C. I:19	
		{ <sup>11</sup> B:515	
}	Brecha	{ <sup>10</sup> B:-	
		C. I:-	
		{ <sup>11</sup> B:-	

Vandevyver M. et  
Plumelle P., J.  
Phys. Chem.  
Solids, 38, 765  
(1977)

}	Local	{ <sup>10</sup> B:592.7	(g)
		C. I:22.7	
		{ <sup>11</sup> B:570	
}	Brecha	{ <sup>10</sup> B:238.8	
		C. I:4	
		{ <sup>11</sup> B:234.8	

### TABLA III. Continuación.

Vandevyver M. et Plumelle P., Phys. Rev., <u>B17</u> , 675 (1978)	}	Local	{	<sup>10</sup> B:592.7 C. I:22.7 <sup>11</sup> B:570	(h)
	}	Brecha	{	<sup>10</sup> B:- C. I:- <sup>11</sup> B:-	

Jain K. P. and Prabhakaran.

Phys. Rev. 88, 1503 (1973)

Calcula las frecuencias de los modos locales del boro. Sus resultados son similares a los cálculos teóricos previos, pero difieren considerablemente con las frecuencias experimentales. No obtiene modos brecha.

Shue - Chu Shen, Progress in Phys., <u>4</u> , 452 (1984)	}	Local	{	<sup>10</sup> B:534 C. I:19 <sup>11</sup> B:515	(i)
	}	Brecha	{	<sup>10</sup> B:- C. I:- <sup>11</sup> B:-	

De la observación de la tabla III, encontramos que solo 4 autores han calculado el modo brecha, sin embargo, no solo los valores que obtienen están demasiado alejados de los valores experimentales, sino también los corrimientos isotópicos (figs. 3 y 8). Los resultados anteriores se graficaron en la figura 9 en forma compacta (ver pág. 38).

## 2.2 El modelo de imperfección.

En la segunda parte de este capítulo vamos a calcular las frecuencias de los fonones localizados con un modelo de imperfección que toma en consideración el cambio de las fuerzas atómicas alrededor de la masa del átomo imperfección. Este modelo ya ha sido usado antes, primero para calcular las frecuencias locales producidas por un átomo de carbón ( $^{12}\text{C}$ ) en arsenuro de galio (Andrade L. y Sánchez M., 1995) y también para obtener los tres fonones locales producidos por  $^{12}\text{C}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{14}\text{C}$  en arsenuro de galio (Andrade L. y Sánchez M., 1997). Ahora lo usaremos aquí para calcular las frecuencias de los modos local y brecha tanto en fosfuro de galio con boro como en arsenuro de aluminio con carbón. Por otro lado, una presentación de resultados preliminares del caso del fosfuro de galio también ha sido hecha (Herrera E., Sánchez M. y Andrade L., 1997) y otra se hará para el caso del arsenuro de aluminio.

En este modelo de imperfección se considera que la red con átomos de masas  $m$  y  $M$  y con interacciones a primeros vecinos tiene además de la masa imperfección  $m'$ , a las constantes de fuerza  $k'$  y  $\kappa'$  alrededor de la masa imperfección cambiadas (fig. 10).

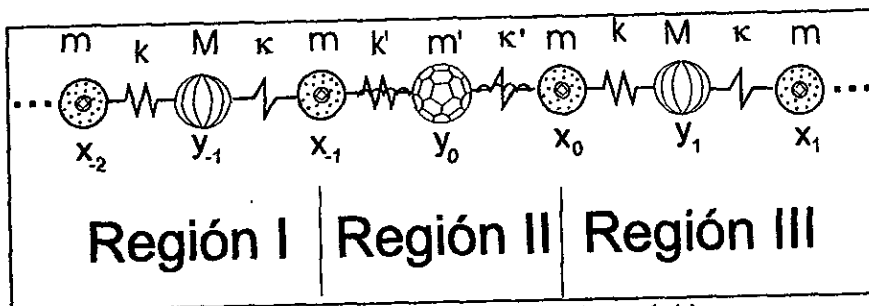


Fig. 10. Red diatómica con una sustitución en el sitio  $y_0$ .

Modelo de imperfección en la dirección  $(\xi, \xi, \xi)$ .

Para calcular las frecuencias de los fonones localizados la red se divide en tres regiones definidas para  $n \in \mathbf{Z}$  de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
 \text{I: } & \begin{cases} x_n, n \in (-\infty, -1] \\ y_n, n \in (-\infty, -1] \end{cases} \\
 \text{II: } & \{x_n, y_n; n = 0\} \quad \dots(33) \\
 \text{III: } & \begin{cases} x_n, n \in [0, \infty) \\ y_n, n \in [1, \infty) \end{cases}
 \end{aligned}$$

Las frecuencias de los fonones localizados se obtendrán resolviendo un problema de valores propios (Andrade L., 1985 ; Andrade L., 1981; Andrade L., 1977<sup>a</sup>). Esto se construye de la siguiente forma. Primero escribiremos las ecuaciones de movimiento para los átomos de la región II; éstas son:

$$\begin{cases} \rho y_{-1} + (\chi - \rho_2 - \rho)x_{-1} + \rho_2 y_0 = 0 \\ \rho_2 x_{-1} + (\varepsilon_1 \chi - \rho_2 - \rho_1)y_0 + \rho_1 x_0 = 0 \\ \rho_1 y_0 + (\chi - \rho_1 - 1)x_0 + y_1 = 0 \end{cases} \quad \dots(34)$$

en donde hemos definido:

$$\begin{aligned}
 \rho &= \frac{\kappa}{k}, \rho_1 = \frac{\kappa'}{k}, \rho_2 = \frac{k'}{k} \\
 \varepsilon &= \frac{M}{m}, \varepsilon_1 = \frac{m'}{m}, \chi = \frac{m\omega^2}{k} \quad \dots(35)
 \end{aligned}$$

De la solución general del problema obtenida con el método de operadores (ver Andrade L., 1987) usando las llamadas condiciones de localización

$$\begin{cases} \lim_{n \rightarrow \pm\infty} x_n = 0 \\ \lim_{n \rightarrow \pm\infty} y_n = 0 \end{cases} \quad \dots(36)$$

que obligan a que las vibraciones se amortigüen, estas condiciones de localización son a su vez las condiciones a la frontera deseadas necesarias que se cumplan para que la solución sea convergente en  $\pm\infty$  y por tanto físicamente aceptable. Construimos la solución para este problema de valor característico, que escribimos como:

$$\begin{cases} x_n = C_2 \left( \frac{1 + \rho E_1}{1 + \rho - \chi} \right) E_1^{-(n+1)}, & n \leq -1 \\ y_n = C_2 E_1^{-n}, & n \leq -1 \end{cases} \quad \text{Región I...}(37)$$

$$y_0 = C_0 \quad n=0, \text{ impureza...}(38)$$

la ecuación anterior expresa matemáticamente la continuidad de la solución que se está proponiendo.

$$\begin{cases} x_n = C_1 \left( \frac{\rho + E_1}{1 + \rho - \chi} \right) E_1^n, & n \geq 0 \\ y_n = C_1 E_1^n, & n \geq 1 \end{cases} \quad \text{Región III...}(39)$$

en donde:

$$E_1 = \frac{\Omega_1 \pm \sqrt{\Omega_1^2 - 4}}{2} \quad \dots(40)$$

$$\Omega_1 = \frac{\varepsilon \chi^2 - (1 + \rho)(\varepsilon + 1)\chi + 2\rho}{\rho}$$

Entonces  $C_0$ ,  $C_1$  y  $C_2$  son constantes arbitrarias que surgen de la solución general. Estas constantes arbitrarias se calculan substituyendo la solución propuesta, ecuaciones 37-39, en las ecuaciones de movimiento atómicas,

ecuaciones 34. Así obtenemos un sistema de tres ecuaciones con las incógnitas  $C_0$ ,  $C_1$  y  $C_2$  que son las siguientes:

$$\begin{cases} \rho C_2 E_1 + (\chi - \rho_2 - \rho) C_2 \left( \frac{1 + \rho E_1}{1 + \rho - \chi} \right) + \rho_2 C_0 = 0 \\ \rho_2 C_2 \left( \frac{1 + \rho E_1}{1 + \rho - \chi} \right) + (\varepsilon_1 \chi - \rho_2 - \rho_1) C_0 + \rho_1 C_1 \left( \frac{\rho + E_1}{1 + \rho - \chi} \right) = 0 \dots (41) \\ \rho_1 C_0 + (\chi - \rho_1 - 1) C_1 \left( \frac{\rho + E_1}{1 + \rho - \chi} \right) + C_1 E_1 = 0 \end{cases}$$

Al factorizar las constantes  $C_0$ ,  $C_1$  y  $C_2$  se obtiene el sistema homogéneo de ecuaciones buscadas:

$$\begin{cases} [\rho(1 + \rho - \chi)E_1 + (\chi - \rho_2 - \rho)(1 + \rho E_1)]C_2 + [\rho_2(1 + \rho - \chi)]C_0 = 0 \\ [\rho_2(1 + \rho E_1)]C_2 + [(\varepsilon_1 \chi - \rho_2 - \rho_1)(1 + \rho - \chi)]C_0 + [\rho_1(\rho + E_1)]C_1 = 0 \dots (42) \\ [\rho_1(1 + \rho - \chi)]C_0 + [(\chi - \rho_1 - 1)(\rho + E_1) + E_1(1 + \rho - \chi)]C_1 = 0 \end{cases}$$

Este sistema de ecuaciones tiene solución distinta de la trivial sólo si el determinante de los coeficientes es cero, el cual escribiremos como:



$$\begin{vmatrix} \rho(1+\rho-\chi)E_1 + (\chi-\rho_2-\rho)(1+\rho E_1) & \rho_2(1+\rho-\chi) & 0 & \dots \\ \rho_2(1+\rho E_1) & (1+\rho-\chi)(\varepsilon_1\chi-\rho_1-\rho_2) & \rho_1(\rho+E_1) & \dots \\ 0 & \rho_1(1+\rho-\chi) & (\chi-\rho_1-1)(\rho+E_1) + (1+\rho-\chi)E_1 & \dots \end{vmatrix} = 0 \quad \dots(43)$$

Al resolver el determinante obtenemos una ecuación para la  $E_1$ :

$$\begin{aligned} & (1+\rho-\chi)(-E_1^2 \rho \rho_2 \rho_1 + \rho_2 \rho^2 - 2 \rho_1 \rho^2 E_1 - \rho_1 \rho^2 \chi + \rho_1 \chi^2 \rho - 2 \rho_2 \rho^2 E_1 - \varepsilon_1 \chi \rho \rho_1 E_1 \\ & + \varepsilon_1 \chi^2 \rho_1 \rho + \rho_1 \chi E_1 \rho - \rho_2 \rho^2 \chi + \rho_2 \rho^2 \rho_1 + \rho_2 \chi^2 \rho + \rho_1 \rho^2 + \varepsilon_1 \chi^2 \rho + \varepsilon_1 \chi^2 \rho^2 - \varepsilon_1 \chi \rho^2 - \varepsilon_1 \chi^3 \rho \\ & - \rho_1 \chi \rho + \rho_2 \chi E_1 \rho - \rho_2 \chi \rho_1 E_1 - 2 \rho_2 \chi \rho_1 \rho + 2 \varepsilon_1 \chi \rho^2 E_1 - \varepsilon_1 \chi \rho^2 \rho_1 - \varepsilon_1 \chi^2 E_1 \rho + \varepsilon_1 \chi^2 \rho_1 E_1 \\ & - \rho_2 \chi \rho + \rho_2 \rho_1 \rho - \rho_2 \varepsilon_1 \chi \rho + \rho_2 \varepsilon_1 \chi E_1 \rho - \rho_2 \varepsilon_1 \chi \rho_1 E_1 - \rho_2 \varepsilon_1 \chi \rho_1 \rho + \rho_2 \varepsilon_1 \chi^2 \rho + \chi \rho_1 \rho^2 E_1 \\ & + \chi \rho_2 \rho^2 E_1 - \rho_2 E_1 \rho^2 \varepsilon_1 \chi + \rho_2 E_1 \rho^2 \varepsilon_1 \chi - \rho_2 E_1 \rho^2 \varepsilon_1 \chi \rho_1 - \rho_2 E_1 \rho^2 \varepsilon_1 \chi \rho_1 + \rho_2 E_1 \rho^2 \varepsilon_1 \chi^2 \\ & - \rho_2 E_1 \rho^2 \rho_1 - \rho_2 E_1 \rho^2 \rho_1 \chi + E_1^2 \rho^2 \rho_2 - E_1^2 \rho^2 \varepsilon_1 \chi + E_1^2 \rho \varepsilon_1 \chi \rho_1 + E_1^2 \rho^2 \rho_1 + \varepsilon_1 \chi \rho^2 \rho_1 E_1 \\ & - \varepsilon_1 \chi^2 \rho^2 E_1) = 0 \end{aligned} \quad \dots(44)$$

En la ecuación 43 se substituye el valor de  $E_1$  de la ecuación (40), y después de realizar el álgebra, se obtiene finalmente la ecuación de valores propios para las frecuencias (ver apéndice A). La ecuación (43) después de haber substituido el valor de  $E_1$  de la ecuación (40) es una ecuación en función de la frecuencia de los fonones localizados y que tiene como parámetros  $\rho$ ,  $\rho_1$ ,  $\rho_2$ ,  $\varepsilon$  y  $\varepsilon_1$ . Es decir, las masas del cristal perfecto y la masa del átomo imperfección, también las constantes de interacción de las fuerzas en el cristal perfecto y las modificaciones de éstas en el átomo impureza.

Una vez obtenida la ecuación de valores propios, se tiene la solución analítica del problema de valor característico. De manera que los parámetros del sistema, es decir, las masas del cristal limpio  $m$  y  $M$ , las constantes de fuerza del cristal perfecto  $k$  y  $\kappa$ , la masa del átomo imperfección  $m'$  y las constantes de las fuerzas del átomo imperfección  $k'$  y  $\kappa'$ ; se substituyen en la ecuación característica (A.1) para la frecuencia de los fonones localizados. Con los parámetros del sistema y los valores de las frecuencias también calculamos el valor de  $E_1$ , ecuación (43). Las constantes  $C_1$  y  $C_2$  son determinadas en términos de la constante  $C_0$  usando las ecuaciones (37-39) de tal forma que la solución del problema de valor característico de la ecuación (A.1) queda indeterminada hasta una constante arbitraria. Esta constante puede ser usada para propósitos de normalización.

### 2.3 Aplicación del modelo al $\text{GaP}^{10,11}\text{B}$ y $\text{AlAs}^{12,13}\text{C}$ .

En esta sección se presenta el cálculo de las frecuencias de los fonones localizados para substitución de boro en fosfuro de galio y también el caso de carbón substitucional en arsenuro de aluminio. Las masas atómicas se toman de las tablas que existen en la literatura, de manera que tenemos un modelo de red de dos parámetros. Estos van a ser calculados a través de las medidas experimentales para los fonones de las orillas de las ramas del cristal perfecto como ha sido anteriormente propuesto (Andrade L., 1987). Para el fosfuro de galio estos valores son los siguientes:

- i)  $M$  es la masa del galio, que se tomara como la del isótopo mas abundante en la naturaleza  $^{69}\text{Ga}$  (60.4%), en unidades de masa atómica. Su valor es  $M=68.95$
- ii)  $m$  es la masa del fósforo, con un valor de  $m=30.98$
- iii) Frecuencia transversal de la rama óptica en el punto  $\Gamma$ ,  $\text{TO}_{\Gamma}=366\text{cm}^{-1}$ .

- iv) Frecuencia transversal de la rama óptica en el punto L,  $TO_L=391\text{cm}^{-1}$ .
- v) Frecuencia transversal de la rama acústica en el punto L,  $TA_L=64\text{cm}^{-1}$ .
- vi) Frecuencia transversal de la rama acústica en el punto  $\Gamma$ ,  $TA_\Gamma=0\text{cm}^{-1}$ .

Para el arsenuro de aluminio tenemos:

- i)  $M$  es la masa del arsénico.  $m=74.95$
- ii)  $m$  es la masa del aluminio, con un valor de  $M=26.99$
- iii) Frecuencia transversal de la rama óptica en el punto  $\Gamma$ ,  $TO_\Gamma=363\text{cm}^{-1}$ .
- iv) Frecuencia transversal de la rama óptica en el punto L,  $TO_L=352\text{cm}^{-1}$ .
- v) Frecuencia transversal de la rama acústica en el punto L,  $TA_L=71\text{cm}^{-1}$ .
- vi) Frecuencia transversal de la rama acústica en el punto  $\Gamma$ ,  $TA_\Gamma=0\text{cm}^{-1}$ .

Como tenemos un modelo de red de dos parámetros y se dispone de los valores extremos de las ramas óptica y acústica que son tres, entonces, los valores no pueden ser usados simultáneamente, pues de acuerdo con las ecuaciones (28-30), en el modelo del cristal perfecto basta considerar dos ecuaciones para tener un sistema de dos ecuaciones con dos incógnitas y encontrar los posibles valores de las constantes de los potenciales interatómicos  $k$  y  $\kappa$ , si no el sistema quedaría sobre determinado. Así que se eligen parejas de ecuaciones seleccionando las combinaciones sin repetición tomadas de dos en dos. El tercer valor extremo se calcula a partir de los valores encontrados de los potenciales. Este determina los dos valores de los parámetros en este modelo. Al calcular estos sistemas de dos ecuaciones con incógnitas en  $k$  y  $\kappa$ , se obtiene por comodidad el valor de  $\rho$ , pues en el modelo se utilizan la razón adimensional de las constantes:

Con lo anterior tenemos que para el fosfuro de galio, los posibles valores de  $\rho$  son:

- i) Al tomar la pareja  $TA_L$  y  $TO_T$ ,  $\rho=26.83$ . Con  $TO_L=360.36$ .
- ii) Con la pareja  $TA_L$  y  $TO_L$ ,  $\rho=31.64$ . Con  $TO_T=396.2$ .
- iii) En la pareja  $TO_L$  y  $TO_T$  no tiene sentido calcular  $\rho$  porque para este sistema en el experimento las máximas frecuencias  $TO_T$  y  $TO_L$  están invertidas en comparación con el modelo teórico propuesto en este trabajo. Sin embargo, si se invierten las bandas, entonces  $\rho=5.71$ . Con  $TA_L=137.57$ .

Para el arsenuro de aluminio, los posibles valores de  $\rho$  son:

- i) Al tomar la pareja  $TA_L$  y  $TO_T$ ,  $\rho=19.11$ . Con  $TO_L=355.9$ .
- ii) Con la pareja  $TA_L$  y  $TO_L$ ,  $\rho=18.67$ . Con  $TO_T=359.1$ .
- iii) La pareja  $TO_L$  y  $TO_T$ ,  $\rho=11.79$ . Con  $TA_L=88.7$ .

Ya lo mencionamos arriba pero es importante señalar que al tomar el punto  $TA_L$  y alguno de los dos puntos de la rama óptica, en el fosforo de galio el punto  $TO_L > TO_T$ ; mientras que en el arsenuro de aluminio  $TO_L < TO_T$ . La inversión de la rama óptica provoca que para el modelo sean más estrechas las ramas de frecuencia del cristal perfecto de lo que en realidad son. Lo anterior significa que muy probablemente la dinámica de la red para estos cristales es mucho más compleja de lo que nosotros estamos considerando en la descripción en este trabajo. El modelo de imperfección introduce otros tres parámetros. La masa imperfección  $m'$  la cual es tomada de las tablas. También las constantes  $k'$  y  $\kappa'$  alrededor del átomo imperfección. Estos se determinan de la siguiente forma como en un trabajo anterior (Andrade L. y Sánchez M., 1995; Andrade L., Miranda G. y Herrera E., 1995; Herrera E. y Andrade L., 1997).

Para el fosforo de galio:

En el caso de que la impureza que se considera es boro, y cuenta con dos isótopos naturales con una abundancia del 80.4% para el  $^{11}\text{B}$  y del 19.6% para el  $^{10}\text{B}$ , se asignan los siguientes valores para las masas que se incorporan en la red diatómica lineal con esta impureza:

- i) La masa del  $^{11}\text{B}=11.0128$ .
- ii) La masa del  $^{10}\text{B}=10.0161$ .
- iii) Los valores de  $\varepsilon$  y  $\varepsilon_1$  se determinan de las definiciones de las ecuaciones (27) y (32).

Para el arsenuro de aluminio:

La impureza que se considera es el carbono, que cuenta con tres isótopos naturales, pero sólo se considerarán dos de ellos, con una abundancia del 98.89% para el  $^{12}\text{C}$  y del 1.10% para el  $^{13}\text{C}$ . Por ello se asignan los siguientes valores para los parámetros que se incorporan en la red diatómica lineal con esta impureza:

- i) La masa del  $^{12}\text{C}=12.00$ .
- ii) La masa del  $^{13}\text{C}=13.01$ .
- iii) Los valores de  $\varepsilon$  y  $\varepsilon_1$  también se determinan de las definiciones de las ecuaciones (27) y (32).

Para determinar  $k'$  y  $\kappa'$  es decir  $\rho_1$  y  $\rho_2$ , se utilizan los resultados reportados en los experimentos (figuras 3 y 4) del cristal imperfecto, de la siguiente manera: para cada uno de los valores de  $\rho$ , se tiene la posibilidad de ajustar las frecuencias de los modos locales y/o brecha producidos por la impureza en cualesquiera de sus isótopos. De tal forma, que puede elegirse de

entre 6 posibles ajustes, combinaciones de los fonones localizados. Estos valores se consideran como las frecuencias  $\omega$  de calibración. De acuerdo con las ecuaciones (35), no se utiliza directamente la frecuencia  $\omega$ , sino la cantidad adimensional  $\chi$ . El ajuste más viable es aquel en el cual se considera una frecuencia del modo local y otra del modo brecha, ambas producidas por uno de los isótopos.

Para el fosforo de galio:

Se toman las frecuencias experimentales de los modos local y brecha simultáneos que produce el  $^{10}\text{B}$  (ver fig. 3).

i)  $\omega_1 = 593.7 \text{ cm}^{-1}$ .

ii)  $\omega_2 = 285.0 \text{ cm}^{-1}$ .

Donde para cada  $\rho$ , las correspondientes  $\chi$  son:

$$\text{iii) } \rho = 26.83 \Rightarrow \begin{cases} \chi_1 = 106.13 \\ \chi_2 = 24.46 \end{cases}$$

$$\text{iv) } \rho = 31.64 \Rightarrow \begin{cases} \chi_1 = 106.23 \\ \chi_2 = 24.48 \end{cases}$$

$$\text{v) } \rho = 5.71 \Rightarrow \begin{cases} \chi_1 = 22.43 \\ \chi_2 = 5.17 \end{cases}$$

Para el arsenuro de aluminio:

Se toman los modos local y brecha simultáneos que produce el  $^{12}\text{C}$ .

i)  $\omega_1=630.0 \text{ cm}^{-1}$ .

ii)  $\omega_2=283.0 \text{ cm}^{-1}$ .

Donde para cada  $\rho$ , las correspondientes  $\chi$  son:

iii)  $\rho = 18.67 \Rightarrow \begin{cases} \chi_1 = 228.72 \\ \chi_2 = 46.15 \end{cases}$

iv)  $\rho = 19.11 \Rightarrow \begin{cases} \chi_1 = 228.79 \\ \chi_2 = 46.17 \end{cases}$

v)  $\rho = 11.79 \Rightarrow \begin{cases} \chi_1 = 145.49 \\ \chi_2 = 29.36 \end{cases}$

Estos valores al incorporarlos junto con los parámetros ya encontrados, producen un sistema de dos ecuaciones con incógnitas en  $\rho_1$  y  $\rho_2$ .

Al resolverse esas ecuaciones, se obtienen las parejas de  $\rho_1$  y  $\rho_2$ . Como estos parámetros involucran los potenciales de interacción, deben ser reales y positivos. Definidos los parámetros anteriores, estos se usan para calcular las frecuencias de los fonones localizados. También se calcula  $E_1$  a través de la ecuación (40) para obtener la solución del problema. Como se mencionó antes, se debe pedir que  $|E_1| < 1$ . Aun cuando se ha obtenido la solución del problema, es ampliamente conocido (Andrade L., 1981; Andrade L., 1989) que si el álgebra que se hace para resolver estos problemas no se realiza en forma adecuada se

pueden incorporar soluciones espúreas, de manera que se ha propuesto como una forma para evitar estas soluciones espúreas que la solución también cumpla con las ecuaciones de movimiento de los átomos en la región cercana a la impureza. De esta forma se asegura que las  $\chi$  encontradas sean realmente modos localizados.

De la figura 10, se consideran ahora las ecuaciones de movimiento de los tres átomos cercanos a la región de la impureza a la izquierda y a la derecha, que escribiremos como:

$$\text{I:} \begin{cases} x_{-3} + (\epsilon\chi - \rho - 1)y_{-2} + \rho x_{-2} = 0 \\ \rho y_{-2} + (\chi - \rho - 1)x_{-2} + y_{-1} = 0 \\ x_{-2} + (\epsilon\chi - \rho - 1)y_{-1} + \rho x_{-1} = 0 \end{cases} \quad \dots(45)$$

$$\text{III:} \begin{cases} x_0 + (\epsilon\chi - \rho - 1)y_1 + \rho x_1 = 0 \\ \rho y_1 + (\chi - \rho - 1)x_1 + y_2 = 0 \\ x_1 + (\epsilon\chi - \rho - 1)y_2 + \rho x_2 = 0 \end{cases} \quad \dots(46)$$

Para completar el esquema también volveremos a escribir las ecuaciones de movimiento de los átomos en la región de la imperfección.

$$\text{II:} \begin{cases} \rho y_{-1} + (\chi - \rho_2 - \rho)x_{-1} + \rho_2 y_0 = 0 \\ \rho_2 x_{-1} + (\epsilon_1 \chi - \rho_2 - \rho_1)y_0 + \rho_1 x_0 = 0 \\ \rho_1 y_0 + (\chi - \rho_1 - 1)x_0 + y_1 = 0 \end{cases} \quad \dots(47)$$

El corrimiento isotópico se calcula con el parámetro  $\epsilon_1$  con el valor de la



masa del otro isótopo, y se resuelven las ecuaciones con los parámetros  $\rho$ ,  $\rho_1$  y  $\rho_2$  anteriores. Con esto se tienen todas las frecuencias de los fonones localizados.

## *Capítulo III*

### Resultados y Conclusiones

En este capítulo se presenta el análisis de las frecuencias del modelo de imperfección propuesto para los cristales fosfuro de galio y arsenuro de aluminio, siguiendo los criterios del capítulo anterior. También se dan las conclusiones del trabajo, junto con las expectativas que en un futuro se esperan realizar.

#### 3.1 Resultados.

En el apéndice D, se presentan las  $\chi$  que generan modos localizados. En estas tablas se muestra cómo el espacio generado por los parámetros  $\rho$ ,  $\rho_1$  y  $\rho_2$  es un espacio muy complicado, pues basta con pequeñas variaciones de estos parámetros para que se pierda la condición de localización. Si se considera de nuevo el sistema de ecuaciones que generan la ecuación de valores propios, se tiene que de un conjunto acoplado de ecuaciones diferenciales lineales de diferencias finitas, se ha pasado a una ecuación no lineal en  $\rho$ ,  $\rho_1$  y  $\rho_2$ . la cual deja de ser sencilla y se vuelve extremadamente sensible a las condiciones iniciales. Además, se presenta un desbalance en los términos del polinomio característico, pues al reagruparlo en potencias de  $\chi$  para encontrar sus raíces, se hacen comparaciones entre cantidades de varios órdenes de magnitud de diferencia, lo que hace más sensible esta búsqueda de raíces. A tal grado que aún con algoritmos tan sofisticados como los incorporados en programas de cómputo científicos (ver apéndice B) se encuentran casos en los cuales las raíces calculadas

del polinomio característico para un conjunto de parámetros fijos, se substituyen de nuevo en el polinomio y dejan de ser solución.

a) Fosforo de Galio:

De los ajustes que se realizaron con las orillas de las ramas en los puntos  $\omega_{TO_L}$  y  $\omega_{TA_L}$ ,  $\omega_{TO_R}$  y  $\omega_{TA_L}$  y  $\omega_{TO_R}$  y  $\omega_{TO_L}$ . ninguno presentó de forma simultánea los modos local y brecha que correspondieran exactamente con los experimentos (figura 3). Por esta razón se realizó una exploración en el espacio  $\rho_1$  y  $\rho_2$  con el objetivo de encontrar la correcta proyección de estos parámetros a lo largo de la dirección de simetría  $(\xi, \xi, \xi)$ . Esta exploración se realizó siguiendo la metodología de proponer ajustes distintos con las frecuencias de los modos localizados para generar parejas de parámetros  $\rho_1$  y  $\rho_2$  que mostraran las tendencias y comportamientos de estos potenciales alrededor de las regiones de interés. Sabemos, además, que si  $\rho_2 \cong 1$  y  $\rho_1 \cong \rho$  se tienen que obtener resultados muy cercanos al caso del modelo de masas, hasta el caso extremo en que cuando  $\rho_2 = 1$  y  $\rho_1 = \rho$  éste corresponde precisamente a ese modelo. Por otro lado, se puede establecer una correspondencia entre el parámetro  $\rho_2$  con el modo local, mientras que el parámetro  $\rho_1$  está asociado al modo brecha.

De esta forma se obtiene que la mejor combinación posible de parámetros es la siguiente:

$$\rho = 26.83$$

$$\rho_1 = 2$$

$$\rho_2 = 22.5, \text{ con los cuales se tienen las frecuencias:}$$

$$\text{Modos locales: } \begin{cases} {}^{10}\text{B: } 592.2 \text{ (cm}^{-1}\text{)} \\ {}^{11}\text{B: } 575.2 \text{ (cm}^{-1}\text{)} \end{cases}$$

$$\text{Modos brecha: } \begin{cases} {}^{10}\text{B: } 323.1 \text{ (cm}^{-1}\text{)} \\ {}^{11}\text{B: } 318.5 \text{ (cm}^{-1}\text{)} \\ {}^{10}\text{B: } 104.60 \text{ (cm}^{-1}\text{)} \\ {}^{11}\text{B: } 104.59 \text{ (cm}^{-1}\text{)} \end{cases}$$

Los corrimientos isotópicos son:

- modo brecha:  $\Delta\omega = 4.6 \text{ (cm}^{-1}\text{)}$
- modo local:  $\Delta\omega = 17.0 \text{ (cm}^{-1}\text{)}$

Los valores experimentales son:

- modo brecha:  $\Delta\omega = 1.5 \text{ (cm}^{-1}\text{)}$
- modo local:  $\Delta\omega = 22.7 \text{ (cm}^{-1}\text{)}$

Estos resultados pueden compararse tanto con los resultados experimentales como con los obtenidos en otros modelos teóricos. Al comparar con los experimentos, se tiene que este nuevo modelo propuesto de sustitución no isotópica corrige notablemente el corrimiento isotópico en el modo brecha, respecto al que se obtuvo en el modelo de masas (ver fig. 8). Para el caso del modo local, también se corrigen las frecuencias de los fonones localizados. Los valores para los corrimientos isotópicos son del orden de magnitud de los resultados experimentales.

Al compararlos con los modelos teóricos de la tabla III (figura 9), se tiene que sólo es posible considerar los modelos de Hayes et al., 1969 (b), Gaur et al., 1971 (c) y Singh et al., 1973 (e), pues los demás no obtienen o pierden el modo brecha. En el modelo de Hayes et al., 1969 (b), el corrimiento isotópico del modo brecha es sólo una pequeña aproximación al corrimiento experimental y el

modo local tiene las frecuencias  $67 \text{ cm}^{-1}$  por arriba del valor experimental. El modelo de Gaur et al., 1971 (c), mejora notablemente las frecuencias del modo brecha y su corrimiento isotópico; sin embargo, las frecuencias del modo local están  $43 \text{ cm}^{-1}$  arriba del valor experimental. El modelo de Singh et al., 1973 (e), obtiene un corrimiento isotópico del modo brecha de  $0 \text{ cm}^{-1}$ . En las figuras 11 y 12, se muestran los desplazamientos máximos con respecto a la posición de equilibrio para el modo brecha y el local, respectivamente. Para facilitar la interpretación de éstas gráficas, se normaliza con respecto al máximo desplazamiento de los nueve átomos de la región de imperfección. En estas figuras se puede observar tanto el amortiguamiento de los modos locales como la diferencia de fases que existen entre los modos locales y los modos brecha. Esta forma en los modos localizados es muy parecida para los distintos valores de  $\rho$ , en cualesquiera de los casos del fosforo de galio de aluminio, por eso sólo se muestran las formas de dos modos representativos.

El suponer que la impureza es una sustitución isotópica (modelo de masas), genera los dos modos localizados, pero las frecuencias de los modos local y brecha son sólo una aproximación a los resultados experimentales. Al eliminar esta suposición y permitir la variación de los potenciales interatómicos de los primeros vecinos, como en este trabajo, los valores de las frecuencias se corrigen y se ajustan más a los valores experimentales, mientras que los corrimientos isotópicos de las frecuencias se encuentran del orden de magnitud de los experimentos.



Fig. 12. Desplazamientos máximos de los átomos en el modo local (GaP:B).

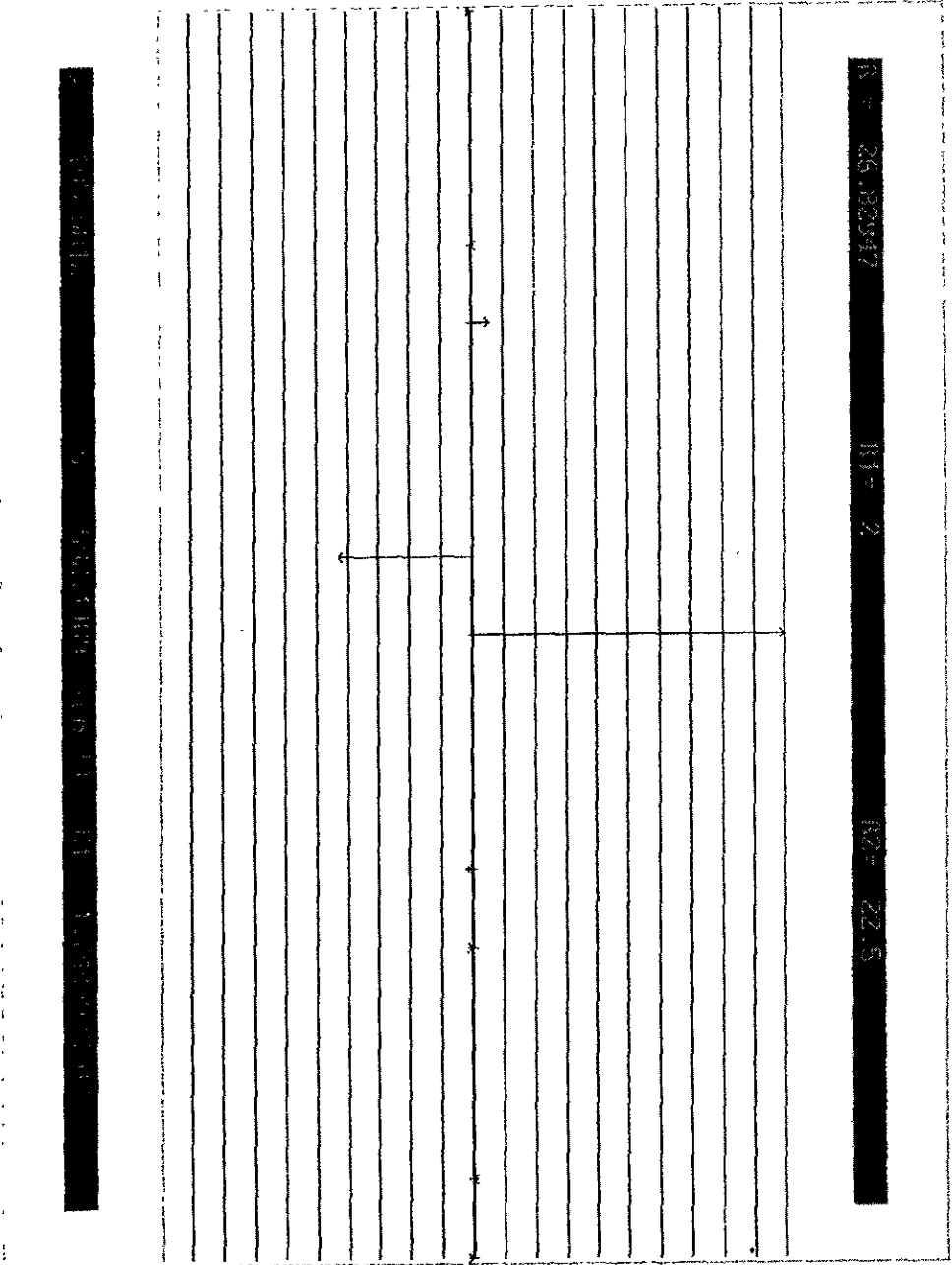


Fig. 13. Espectro de Frecuencias del Fosforo de Galio (GaP) con Boro (B) para el modelo de imperfección

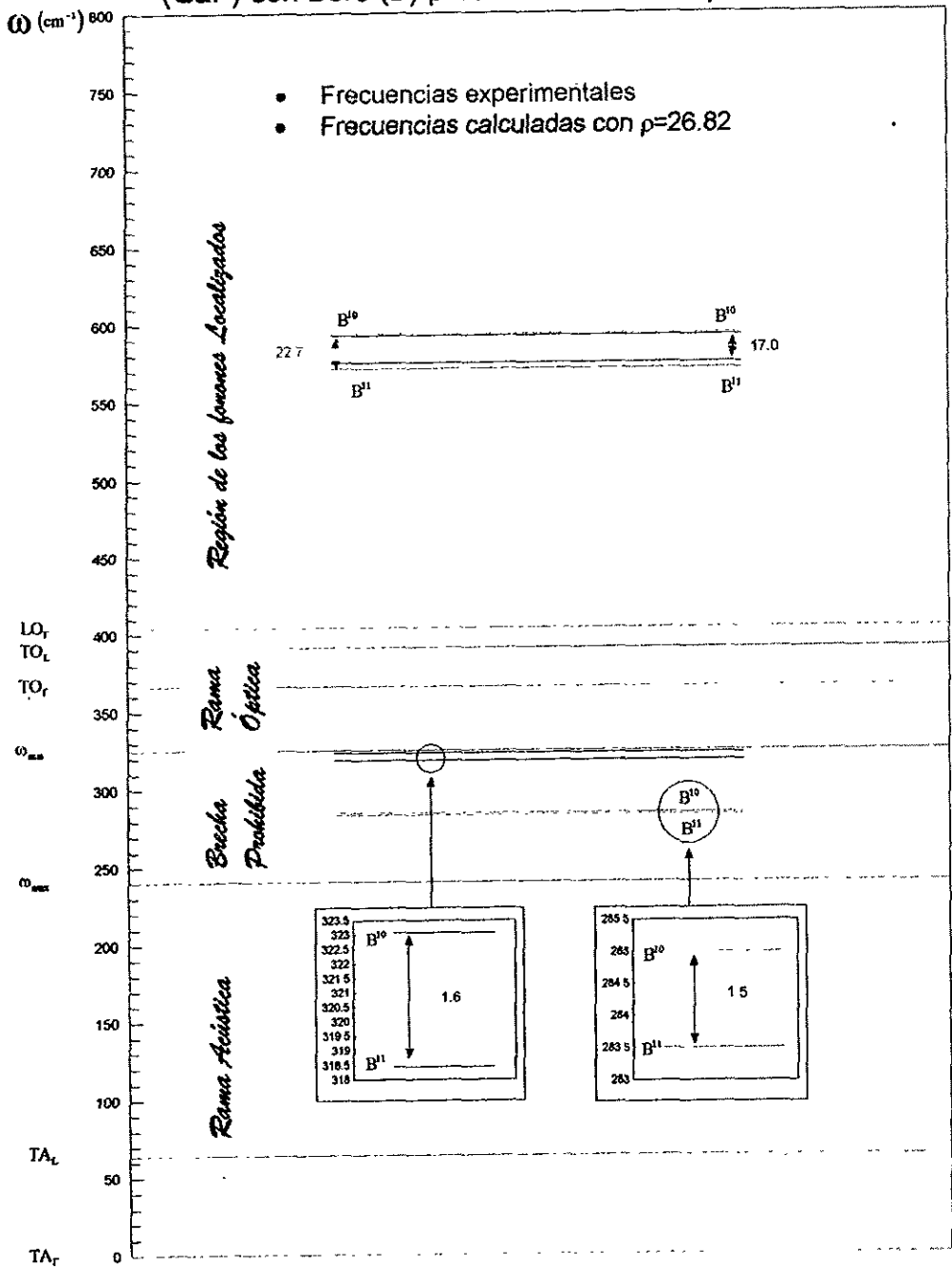
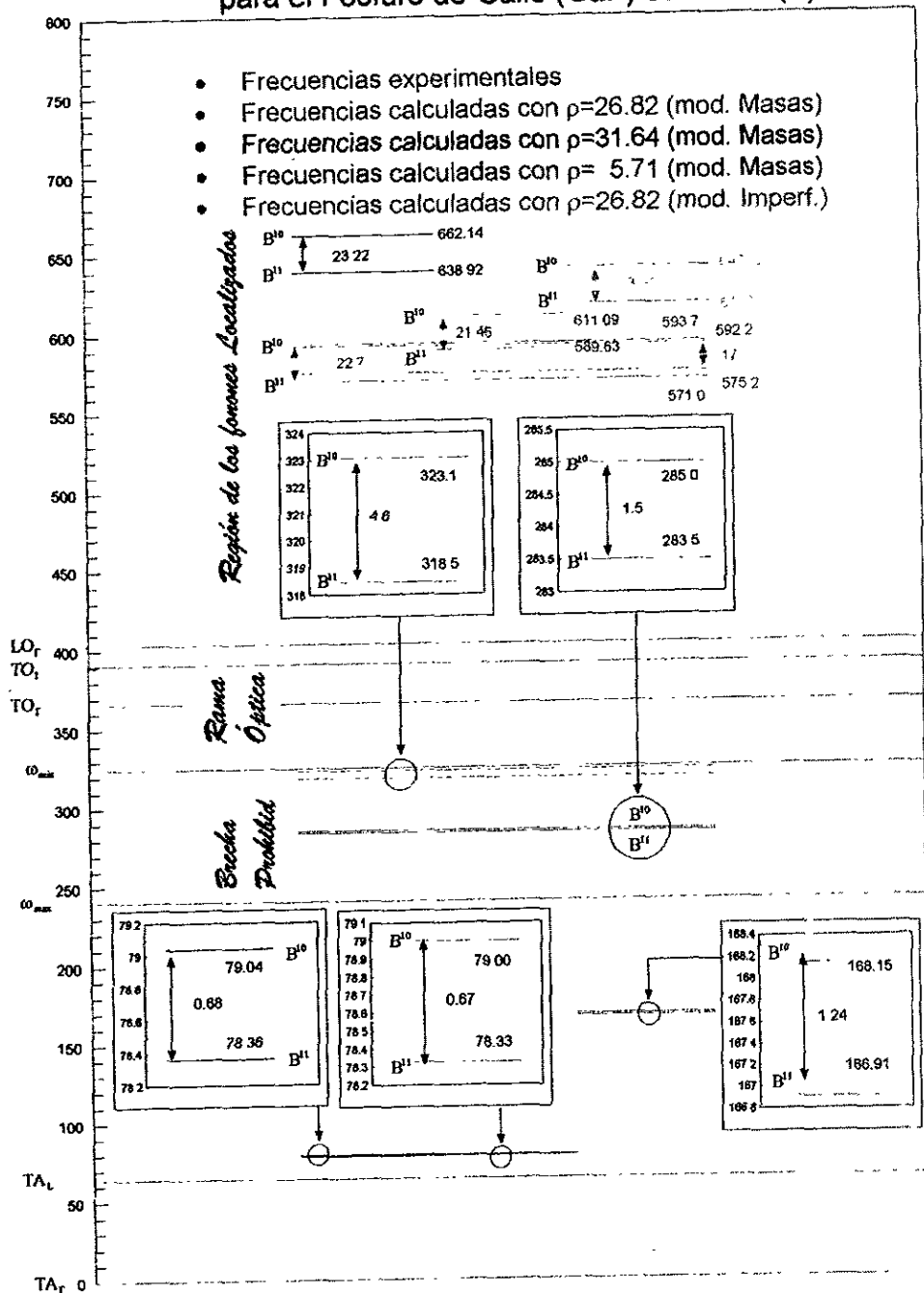




Fig. 14. Comparación entre los modelos de imperfección y masas para el Fosforo de Galio (GaP) con Boro (B)

$\omega$  ( $\text{cm}^{-1}$ )





## b) Arsenuro de Aluminio:

Para el caso del arsenuro de aluminio, se observa que la dinámica de la red es más sencilla que en el caso del fosfuro de galio. Pues tanto las ramas del cristal perfecto como los modos localizados son mejor descritos por este modelo de red. Este tipo de comportamiento es muy interesante, ya que ambos cristales están formados por elementos de las columnas IIIA - VA (GaP) ó IVA - VIA (AlAs), y las propiedades de este tipo de cristales son, en principio, parecidas. Sin embargo, con estos dos ejemplos se muestra como en el fosfuro de galio la dinámica de la red es más compleja, mientras que en el arsenuro de aluminio es aparentemente más sencilla.

En el apéndice D, se muestran los modos encontrados para el ajuste  $\omega_{TO_T}$  y  $\omega_{TO_L}$ ,  $\omega_{TO_T}$  y  $\omega_{TA_L}$  y  $\omega_{TO_L}$  y  $\omega_{TA_L}$ . Sin embargo, estos tres ajustes no reprodujeron de forma simultánea los modos localizados y brechas de acuerdo con el modelo teórico de Robbie et al. (1995), por lo que también se tuvo recurrir al ajuste de los parámetros  $\rho_1$  y  $\rho_2$  hasta encontrar la mejor pareja que generara las dos frecuencias localizadas a la vez.

En las figuras 18 se muestran estas frecuencias, las cuales se comparan con los resultados de Robbie et al. (1995):

$$\bullet \text{modo brecha: } \rho = 11.78 \Rightarrow \Delta\omega = 3.7 \text{ cm}^{-1}$$

$$\rho = 19.11 \Rightarrow \Delta\omega = 4.2 \text{ cm}^{-1}$$

$$\rho = 18.67 \Rightarrow \Delta\omega = 1.8 \text{ cm}^{-1}$$

$$\bullet \text{modo local: } \rho = 11.78 \Rightarrow \Delta\omega = 14.5 \text{ cm}^{-1}$$

$$\rho = 19.11 \Rightarrow \Delta\omega = 13.0 \text{ cm}^{-1}$$

$$\rho = 18.67 \Rightarrow \Delta\omega = 13.1 \text{ cm}^{-1}$$

Resultado teórico para el modo brecha y modo local:

- modo brecha:  $\Delta\omega = 4.0 \text{ cm}^{-1}$
- modo local:  $\Delta\omega = 14.0 \text{ cm}^{-1}$

Con estos modos se realizan las gráficas que se muestran en las figuras 16 y 17, donde se observa la forma de los desplazamientos máximos en el modos local y brecha, respectivamente. Como en el caso del fosfuro de galio, la forma en los modos es muy parecida para los distintos valores de  $\rho$ , así que sólo se muestran dos modos representativos.

Fig. 16. Desplazamientos máximos de los átomos en el modo brecha (AlAs:C).

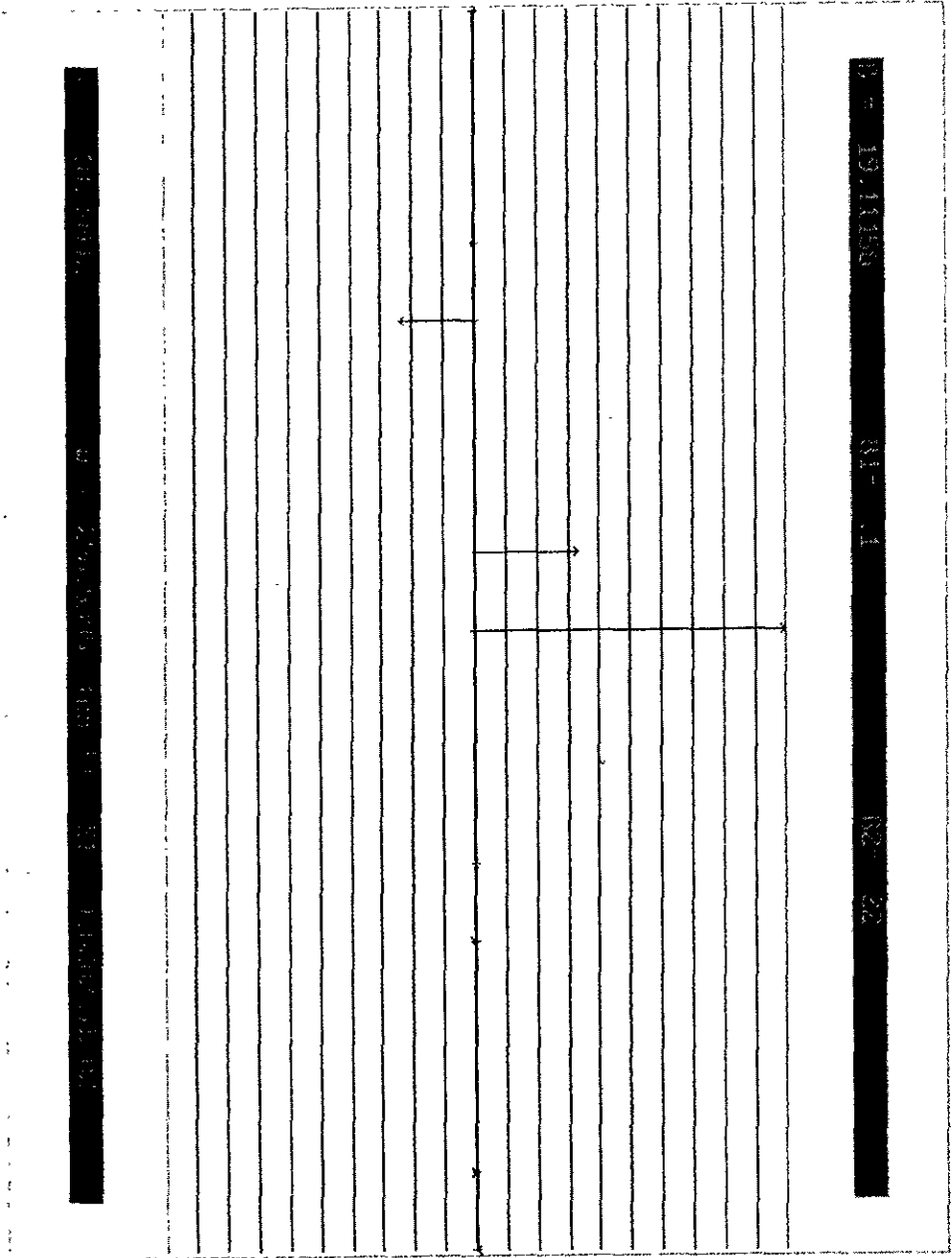


Fig. 17. Desplazamientos máximos de los átomos en el modo local (AIAs:C).

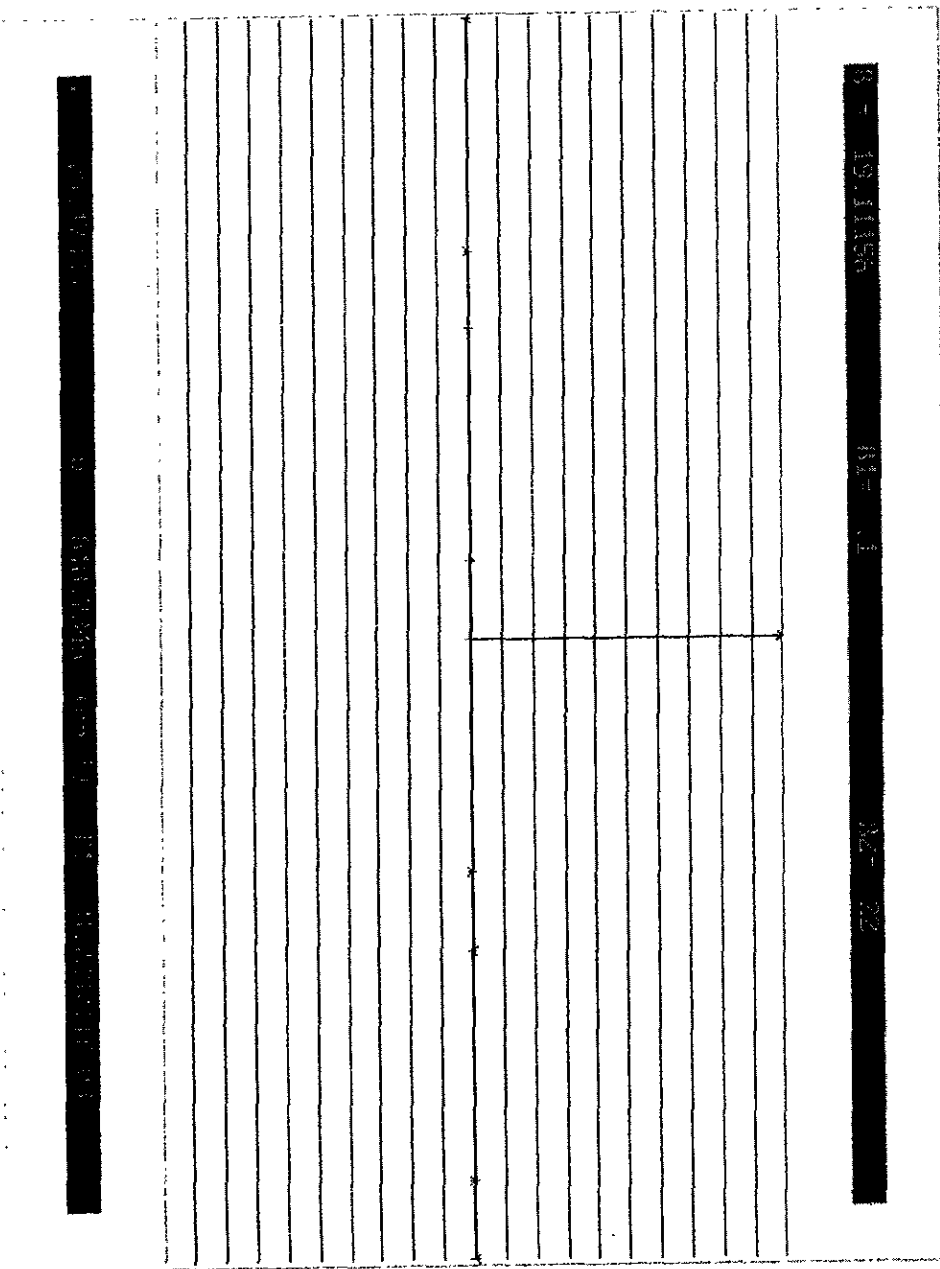
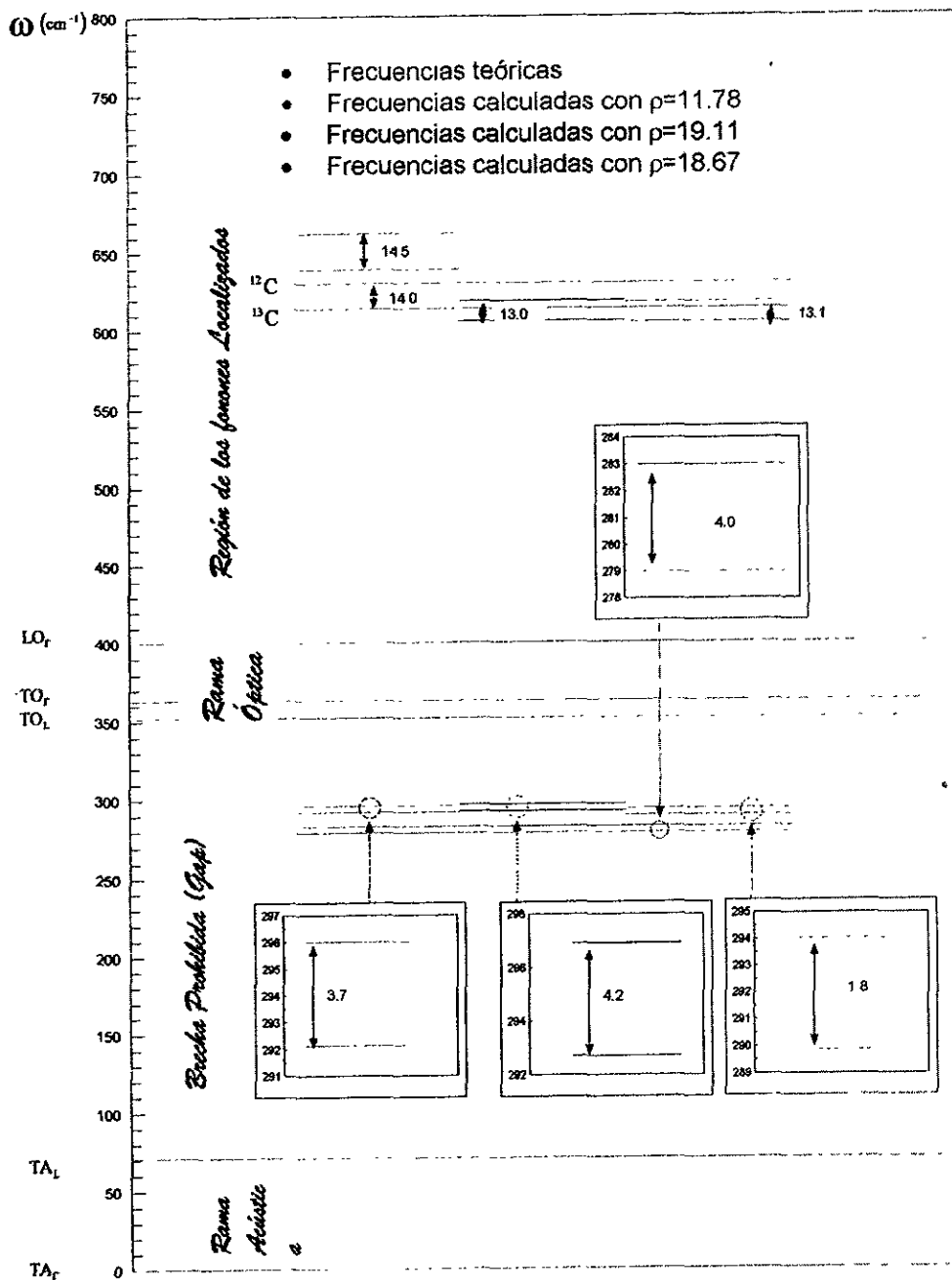


Fig. 18. Espectro de Frecuencias del Arsenuro de Aluminio (AlAs) con Carbono (C) para el modelo de imperfección



## 3.2 Conclusiones.

Al analizar los resultados obtenidos se observa que también se obtienen los modos local y brecha simultáneamente, como en el modelo de masas y que aunque el valor numérico del modo brecha es una aproximación del orden de magnitud respecto del experimental es importante señalar que este modo se encuentra en la región prohibida conocida como la brecha del cristal perfecto. Además, el corrimiento isotópico es comparable con el experimental para ambos modos localizados, lo cual permite mantener la suposición de que el acoplamiento de otros planos y direcciones de vibración no existe en estos movimientos vibratoriales de la red zinc - blenda y que sólo el eje  $(\xi, \xi, \xi)$  es importante que sea considerado. Así que es una buena aproximación de la dinámica de la red.

Para poder obtener los resultados anteriores, se extendió el modelo de masas y se incorporó el hecho de que la sustitución de un átomo por otro debe modificar los potenciales interatómicos. Pero por mantenerse los átomos en su estado base o en el de menor energía de vibración, sigue siendo válida la aproximación del potencial armónico. Al incorporar esta nueva información de la dinámica de la red, se obtiene un polinomio característico de quinto grado para frecuencias. Este polinomio es complicado ya que tiene la dificultad de manipular doscientos dieciséis términos. Como era de esperarse, los resultados dieron valores más cercanos que el modelo de masas a los reportados por los experimentos tanto en las frecuencias como en los corrimientos isotópicos. Sin embargo, para obtener lo anterior, fue necesario realizar una exploración en el espacio de las constantes adimensionales de interacción para encontrar la combinación que diera los mejores valores, pues el ajuste propuesto que se pensó daría la proyección adecuada del espacio no lineal  $\rho_1$ - $\rho_2$ , sólo generaba un modo localizado a la vez de acuerdo al experimento, y no los modos experimentales



existentes de manera simultánea.

En los resultados para el arsenuro de aluminio se encontró que el modelo predice la existencia de un tercer modo localizado en la región de la brecha. Así que se requiere de la realización de un experimento para la búsqueda de este modo brecha. Claro, que puede ocurrir que la intensidad de este pico sea muy pequeña con respecto a los otros modos.

Otro resultado interesante es que en la búsqueda por la pareja  $\rho_1$ - $\rho_2$ , se encontró que el potencial  $\rho_1$  está relacionado con la banda prohibida que corresponde a la región de los modos brecha, mientras que el potencial  $\rho_2$  lo está con los modos locales. Al parametrizar la red diatómica de la manera en que se hizo, se encuentra en un primer análisis, una simetría en los potenciales de interacción. Esta simetría parece recalcar en la búsqueda de la pareja  $\rho_1$ - $\rho_2$ , pues las combinaciones de estos potenciales que produjeron los modos localizados tanto en el caso de sólo un modo a la vez como la pareja que los producía simultáneamente, la suma es del mismo orden en todos los casos.

Los ajustes y formas de encontrar los modos localizados muestran la gran cantidad de pasos algebraicos y de términos contenidos en cada una de las ecuaciones características lo que hace difícil el tratamiento sin la ayuda de equipos de cómputo. Así mismo, muestran como con un modelo tan sencillo que depende de un parámetro del cristal perfecto ( $\rho$ ) y dos del cristal con impurezas ( $\rho_1$  y  $\rho_2$ ), genera una gran cantidad de resultados, por lo que comparando con los modelos teóricos de la tabla III, que cuentan con más parámetros (hasta 14 para el cristal perfecto y otros 14 para la impureza), no se explica uno porque no reportan la gran cantidad de resultados que obtienen.

El modelo de imperfección que aquí se presenta tiene una gran

importancia, pues además de ser un modelo no resuelto en la literatura y dar solución analítica y cerrada a un problema abierto, la dinámica de la red permite ajustar de forma conveniente los fonones localizados. Por otro lado, éste es un modelo más en donde se muestra que el método de las ecuaciones en diferencias permite la posibilidad de resolver problemas abiertos en la literatura para sistemas que después de casi 50 años aún no se han podido explicar de manera satisfactoria.

### 3.3 Trabajo a futuro.

Como se ha mencionado en las conclusiones, el modelo es una buena aproximación a la dinámica de la red cristalina; sin embargo, aún falta incorporar interacciones mas complicadas, como sucede en la naturaleza. Con ello se corrige la inversión de la banda óptica del cristal perfecto como sucede en el caso del fosforo de galio. Este tipo de interacciones, como las de los segundos vecinos a la impureza (o de orden superior), o situaciones donde la impureza se localice intersticialmente o cuando exista una concentración de impurezas tal que dejen de ser válidas las suposiciones básicas del modelo. Es necesario desarrollar la metodología para atacar estas configuraciones. De esta manera, se espera seguir generalizando los resultados innovadores y constituir así una nueva teoría con validez general para cualquier tipo de red cristalina diatómica con simetría zinc - blenda.

## *Apéndice A*

### **Ecuación de valores propios del modelo de imperfección.**

[ Al desarrollar la siguiente ecuación y substituir los parámetros "a", "b", "c", "d", "e":

$$[ \quad 4 a^2 d^2 (\Omega 1^2 - 4) - e^2 = 0$$

$$[ \quad e := b^2 - 4 a c - d^2 - a^2 (\Omega 1^2 - 4)$$

$$[ \quad \Rightarrow 4 a^2 d^2 (\Omega 1^2 - 4) - (b^2 - 4 a c - d^2 - a^2 (\Omega 1^2 - 4))^2 = 0$$

$$[ \quad \quad \quad d := a \Omega 1 + b$$

$$[ \quad \Rightarrow 4 a^2 (a \Omega 1 + b)^2 (\Omega 1^2 - 4)$$

$$[ \quad \quad \quad - (b^2 - 4 a c - (a \Omega 1 + b)^2 - a^2 (\Omega 1^2 - 4))^2 = 0$$

$$[ \quad a := -\varepsilon 1 \chi \rho 1 \rho + \rho 2 \rho 1 \rho - \rho 2 \rho^2 \varepsilon 1 \chi + \varepsilon 1 \chi \rho^2 - \rho 1 \rho^2 - \rho 2 \rho^2$$

$$[ \quad \quad \quad + \rho 2 \rho 1 \rho^2 + \rho 2 \varepsilon 1 \chi \rho 1 \rho$$

$$\begin{aligned}
b := & \rho^2 \varepsilon_1 \chi \rho_1 + \rho^2 \rho^2 \varepsilon_1 \chi \rho_1 + \rho^2 \rho^2 \varepsilon_1 \chi - \varepsilon_1 \chi \rho_1 \rho^2 + \varepsilon_1 \chi^2 \rho \\
& - \varepsilon_1 \chi^2 \rho_1 + 2 \rho^2 \rho^2 - 2 \varepsilon_1 \chi \rho^2 + \varepsilon_1 \chi \rho_1 \rho + 2 \rho_1 \rho^2 - \rho^2 \chi \rho^2 \\
& + \varepsilon_1 \chi^2 \rho^2 - \rho_1 \chi \rho - \rho_1 \chi \rho^2 + \chi \rho^2 \rho_1 - \rho^2 \varepsilon_1 \chi \rho - \rho^2 \chi \rho \\
& + \rho^2 \rho^2 \rho_1 \chi - \rho^2 \rho^2 \varepsilon_1 \chi^2
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
c := & \rho^2 \varepsilon_1 \chi \rho_1 \rho + \rho^2 \chi \rho^2 - \rho^2 \rho_1 \rho^2 - \varepsilon_1 \chi^2 \rho + \rho_1 \chi \rho - \rho_1 \rho^2 \\
& - \rho^2 \rho^2 + \varepsilon_1 \chi^3 \rho - \rho_1 \chi^2 \rho - \varepsilon_1 \chi^2 \rho_1 \rho - \varepsilon_1 \chi^2 \rho^2 + \varepsilon_1 \chi \rho_1 \rho^2 \\
& - \rho^2 \varepsilon_1 \chi^2 \rho + \rho_1 \chi \rho^2 + \rho^2 \varepsilon_1 \chi \rho - \rho^2 \rho_1 \rho + \varepsilon_1 \chi \rho^2 + \rho^2 \chi \rho \\
& - \rho^2 \chi^2 \rho + 2 \chi \rho^2 \rho_1 \rho
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow & 4 \%4^2 (\%4 \Omega_1 + \rho^2 \varepsilon_1 \chi \rho_1 + \rho^2 \rho^2 \varepsilon_1 \chi \rho_1 + \%2 - \%6 + \varepsilon_1 \chi^2 \rho \\
& - \varepsilon_1 \chi^2 \rho_1 + 2 \rho^2 \rho^2 - 2 \varepsilon_1 \chi \rho^2 + \%3 + 2 \rho_1 \rho^2 - \rho^2 \chi \rho^2 + \varepsilon_1 \chi^2 \rho^2 \\
& - \rho_1 \chi \rho - \rho_1 \chi \rho^2 + \chi \rho^2 \rho_1 - \%5 - \rho^2 \chi \rho + \rho^2 \rho^2 \rho_1 \chi - \rho^2 \rho^2 \varepsilon_1 \chi^2)^2 \\
& (\Omega_1^2 - 4) - \left( (\rho^2 \varepsilon_1 \chi \rho_1 + \rho^2 \rho^2 \varepsilon_1 \chi \rho_1 + \%2 - \%6 + \varepsilon_1 \chi^2 \rho - \varepsilon_1 \chi^2 \rho_1 \right. \\
& + 2 \rho^2 \rho^2 - 2 \varepsilon_1 \chi \rho^2 + \%3 + 2 \rho_1 \rho^2 - \rho^2 \chi \rho^2 + \varepsilon_1 \chi^2 \rho^2 - \rho_1 \chi \rho \\
& \left. - \rho_1 \chi \rho^2 + \chi \rho^2 \rho_1 - \%5 - \rho^2 \chi \rho + \rho^2 \rho^2 \rho_1 \chi - \rho^2 \rho^2 \varepsilon_1 \chi^2) - 4 \%4 ( \right. \\
& \%1 + \rho^2 \chi \rho^2 - \rho^2 \rho_1 \rho^2 - \varepsilon_1 \chi^2 \rho + \rho_1 \chi \rho - \rho_1 \rho^2 - \rho^2 \rho^2 + \varepsilon_1 \chi^3 \rho \\
& \left. - \rho_1 \chi^2 \rho - \varepsilon_1 \chi^2 \rho_1 \rho - \varepsilon_1 \chi^2 \rho^2 + \%6 - \rho^2 \varepsilon_1 \chi^2 \rho + \rho_1 \chi \rho^2 + \%5 \right. \\
& \left. - \rho^2 \rho_1 \rho + \varepsilon_1 \chi \rho^2 + \rho^2 \chi \rho - \rho^2 \chi^2 \rho + 2 \chi \rho^2 \rho_1 \rho) - (\%4 \Omega_1 \right. \\
& \left. + \rho^2 \varepsilon_1 \chi \rho_1 + \rho^2 \rho^2 \varepsilon_1 \chi \rho_1 + \%2 - \%6 + \varepsilon_1 \chi^2 \rho - \varepsilon_1 \chi^2 \rho_1 + 2 \rho^2 \rho^2 \right. \\
& \left. - 2 \varepsilon_1 \chi \rho^2 + \%3 + 2 \rho_1 \rho^2 - \rho^2 \chi \rho^2 + \varepsilon_1 \chi^2 \rho^2 - \rho_1 \chi \rho - \rho_1 \chi \rho^2 \right)
\end{aligned}$$

$$+ \chi \rho^2 \rho^1 - \%5 - \rho^2 \chi \rho + \rho^2 \rho^2 \rho^1 \chi - \rho^2 \rho^2 \varepsilon^1 \chi^2)^2 - \%4^2 (\Omega^2 - 4))^2$$

$$= 0$$

$$\%1 := \rho^2 \varepsilon^1 \chi \rho^1 \rho$$

$$\%2 := \rho^2 \rho^2 \varepsilon^1 \chi$$

$$\%3 := \varepsilon^1 \chi \rho^1 \rho$$

$$\%4 := -\%3 + \rho^2 \rho^1 \rho - \%2 + \varepsilon^1 \chi \rho^2 - \rho^1 \rho^2 - \rho^2 \rho^2 + \rho^2 \rho^1 \rho^2 + \%1$$

$$\%5 := \rho^2 \varepsilon^1 \chi \rho$$

$$\%6 := \varepsilon^1 \chi \rho^1 \rho^2$$

$$\Omega^2 := \frac{\varepsilon \chi^2 - (\rho + 1)(\varepsilon + 1)\chi + 2\rho}{\rho}$$

$$\Rightarrow \chi(\chi - \rho - 1)^2 (-\chi^2 \rho^2 \varepsilon^1 \rho^1 \rho^2 \varepsilon - 4 \rho^1 \chi^2 \rho^2 \rho^2 \varepsilon^1 + \chi^3 \varepsilon^1 \rho^1 \rho^2 \varepsilon$$

$$- 2 \chi \rho^2 \rho^2 \varepsilon + 2 \chi \varepsilon^1 \rho^1 \rho^2 \rho^2 \varepsilon + 2 \varepsilon^1 \chi \rho^1 \rho^2 \rho^2 - \chi^3 \rho^2 \varepsilon^1 \rho^1 \rho^2 \varepsilon^2$$

$$- \chi^3 \varepsilon^1 \rho^2 \varepsilon^2 - \rho \varepsilon^1 \chi^2 \rho^1 \rho^2 - 2 \rho^2 \varepsilon^1 \chi^3 \rho^1 \rho^2 \varepsilon - 2 \chi^2 \rho^2 \varepsilon^1 \rho^1 \rho^2 \varepsilon$$

$$- \rho \rho^2 \varepsilon^1 \chi^2 - \chi^2 \rho \varepsilon^1 \rho^1 \rho^2 \varepsilon^2 - 2 \varepsilon^1 \chi^4 \rho \rho^1 \varepsilon + \rho^2 \rho^2 \chi^2 \varepsilon$$

$$+ 2 \rho \varepsilon^1 \chi^3 \rho^1 \rho^2 \varepsilon - \chi^2 \rho \varepsilon^1 \rho^1 \rho^2 \varepsilon - \chi^2 \rho^2 \varepsilon^1 \rho^1 \rho^2 \varepsilon + 2 \chi^3 \varepsilon^1 \rho \rho^1 \varepsilon$$

$$- \chi^3 \rho^2 \varepsilon^1 \rho^1 \rho^2 \rho \varepsilon^2 + 2 \rho^2 \rho^2 \varepsilon^1 \chi \rho^1 + 2 \rho^2 \rho^2 \chi \rho^1 + 2 \rho^1 \rho^2 \rho^2 \chi \rho^2$$

$$- 2 \rho^2 \varepsilon^1 \chi^3 \rho^1 \rho^2 \varepsilon - 4 \chi \rho^2 \varepsilon^1 \rho^1 \rho^2 \rho + 2 \rho^2 \rho^1 \rho^2 \chi^2 \varepsilon^2 - \rho^2 \rho^2 \varepsilon^1 \chi^3 \rho^1$$

$$+ \chi^3 \rho^2 \varepsilon^1 \rho^1 \rho^2 \varepsilon^2 - \chi \rho^2 \rho^2 \varepsilon^2 + \rho^2 \rho^2 \varepsilon^1 \chi^2 \rho^1 + \rho^2 \rho^2 \varepsilon^1 \chi^2 \rho^1$$

$$+ 2 \rho^1 \rho \varepsilon^1 \chi^3 \varepsilon - \chi^2 \rho^2 \rho^1 \varepsilon^2 - 2 \chi^2 \rho^1 \rho^2 \rho \varepsilon^1 \varepsilon + \rho^2 \varepsilon^1 \chi^4 \rho^1 \rho^2 \varepsilon^2$$

$$- 2 \chi \rho^2 \rho^2 \varepsilon^1 \rho^1 \rho^2 - 2 \chi \rho^2 \rho^1 \rho^2 \varepsilon^2 + \varepsilon^1 \chi^4 \rho^2 \varepsilon^2 - \chi^2 \rho^2 \varepsilon^1 \rho^1 \rho^2 \varepsilon^2$$

$$- 2 \rho^2 \chi^3 \varepsilon^1 \rho^1 \varepsilon + \chi^3 \varepsilon^1 \rho^1 \rho \varepsilon^2 + 2 \chi \rho^2 \varepsilon^1 \rho^1 \rho^2 \rho \varepsilon - \chi^3 \varepsilon^1 \rho^1 \rho^2 \varepsilon^2$$

$$- \rho^1 \chi^2 \rho^2 \varepsilon^1 - 2 \varepsilon^1 \chi^3 \rho \rho^2 \rho^1 - \chi^2 \rho^2 \rho^1 \rho^2 \varepsilon^2 + \chi^2 \rho \rho^2 \varepsilon^1 \varepsilon^2$$

$$\begin{aligned}
& +\varepsilon^2 \chi^3 \rho^2 \rho_1 + \varepsilon^2 \chi^3 \rho^2 \rho_2 + \rho^2 \chi^3 \rho_1 \rho \varepsilon^2 + \rho^2 \chi^3 \rho_1 \varepsilon^2 \\
& + 2\rho \rho^2 \varepsilon \chi^3 \varepsilon + \rho^2 \rho^2 \chi^2 \varepsilon^2 - 2\chi \rho^2 \varepsilon^2 \rho_1^2 \rho - 4\rho^2 \varepsilon \chi^2 \rho_1^2 \rho \varepsilon \\
& + 2\rho^2 \varepsilon \chi^3 \rho_1^2 \varepsilon^2 + 2\varepsilon^2 \chi^2 \rho_1^2 \rho \rho_2 + 2\chi^3 \rho_1 \rho^2 \rho_2 \varepsilon \varepsilon^2 - \rho_1^2 \rho^2 \chi \\
& + 2\rho^2 \varepsilon \chi^2 \rho_1 + \rho_1^2 \chi^2 \rho^2 \rho_2 \varepsilon + \chi^2 \rho \rho_1^2 \varepsilon^2 - 2\chi^3 \rho_2 \varepsilon \rho \varepsilon^2 \\
& - \varepsilon^2 \chi^5 \rho \varepsilon^2 + \rho^2 \chi^2 \varepsilon \rho_1 + \chi^4 \varepsilon^2 \rho \varepsilon^2 - \rho \rho_1^2 \chi^3 \varepsilon^2 - \chi \rho^2 \varepsilon^2 \rho_1^2 \\
& - \chi^4 \varepsilon^2 \rho_1 \varepsilon + 2\rho^2 \varepsilon \chi^4 \rho \varepsilon^2 - \chi^2 \rho_1^2 \rho^2 \rho_2 \varepsilon^2 + \chi^2 \rho \rho^2 \varepsilon^2 \\
& - 2\chi^3 \rho_2 \rho_1 \rho \varepsilon^2 + \chi^3 \rho_1^2 \varepsilon \varepsilon^2 - \rho^2 \varepsilon^2 \chi^2 \rho^2 + 2\chi^2 \rho_2 \rho_1 \rho \varepsilon^2 \\
& - 2\chi \rho^2 \varepsilon \rho_1^2 + 2\rho^2 \varepsilon^2 \chi^2 \rho_1 \rho - \rho_1^2 \chi^4 \varepsilon \varepsilon^2 + 2\chi^3 \rho_2 \varepsilon \rho_1 \varepsilon^2 \\
& - \chi^2 \rho^2 \varepsilon \rho_1 \varepsilon^2 - \chi^2 \rho_2 \rho_1^2 \varepsilon^2 + \chi^3 \rho_2 \varepsilon^2 \rho_1 \varepsilon^2 - \rho \rho^2 \chi^3 \varepsilon^2 \\
& - \chi^4 \varepsilon^2 \rho_1^2 \varepsilon^2 + \chi^3 \rho \varepsilon^2 \rho_1^2 \varepsilon^2 - \rho^2 \varepsilon^2 \chi^3 \rho_1 - 2\chi^3 \varepsilon \rho_1 \rho \varepsilon^2 \\
& + \rho^2 \varepsilon^2 \chi^2 \rho_1^2 + \rho^2 \varepsilon^2 \chi^2 \rho_1 + 2\varepsilon \chi^4 \rho_1 \rho \varepsilon^2 - \rho^2 \varepsilon^2 \chi^5 \rho_1 \varepsilon^2 \\
& + 2\chi^3 \rho_2 \varepsilon \rho_1 \varepsilon - \chi^2 \rho^2 \rho^2 \varepsilon \rho_1 \varepsilon^2 + 2\rho^2 \varepsilon \chi^3 \rho_1 \rho \varepsilon^2 \\
& + \rho^2 \varepsilon \chi^4 \rho_1 \varepsilon^2 - \chi^4 \varepsilon^2 \rho_1 \varepsilon^2 - 2\rho^2 \varepsilon \chi^4 \rho_1 \varepsilon^2 - 2\rho^2 \varepsilon \chi^4 \rho_1 \rho \varepsilon^2 \\
& + 2\rho^2 \chi^2 \rho \varepsilon \rho_1 - \rho^2 \chi^2 \rho^2 \varepsilon - \chi^2 \rho_2 \rho_1^2 \varepsilon + \rho^2 \rho_1^2 \chi^3 \varepsilon^2 \\
& + \rho^2 \rho_1^2 \chi^3 \rho \varepsilon^2 + \varepsilon^2 \chi^5 \rho_1 \varepsilon^2 + \chi^3 \varepsilon \rho_1^2 \varepsilon - \chi \rho^2 \varepsilon^2 \rho_1^2 \rho^2 \\
& - 2\chi \rho^2 \rho_1^2 \varepsilon - \chi \rho^2 \rho_1^2 \varepsilon^2 + \chi^3 \rho^2 \rho_2 \varepsilon^2 \rho_1 \varepsilon^2 - \rho^2 \chi^2 \rho \varepsilon \\
& + 2\chi \rho_1^2 \rho \rho_2 \varepsilon + 2\chi \rho_1^2 \rho^2 \rho_2 \varepsilon + \chi^4 \rho \varepsilon^2 \varepsilon + \chi^3 \rho_2 \varepsilon^2 \rho^2 \varepsilon^2 \\
& + 4\chi^2 \rho^2 \rho^2 \varepsilon \varepsilon - 4\chi \rho^2 \rho^2 \rho_1 \varepsilon + 4\chi^2 \rho^2 \varepsilon \rho_1 \varepsilon - \chi^2 \rho^2 \rho^2 \varepsilon \varepsilon^2 \\
& + 2\chi^2 \varepsilon \rho_1 \rho^2 \varepsilon^2 + \chi^2 \rho \rho_1^2 \varepsilon - 2\chi^3 \rho \rho_2 \varepsilon^2 \rho_1 \varepsilon^2 + 2\chi^2 \rho^2 \rho^2 \varepsilon \varepsilon^2 \\
& + \chi^2 \rho \rho^2 \varepsilon + \varepsilon^2 \chi^3 \rho \rho_2 + \varepsilon^2 \chi^3 \rho \rho_1 + 2\rho^2 \varepsilon \chi \rho \rho_1 \\
& + 2\rho^2 \rho_1^2 \rho \varepsilon \chi^2 + 2\rho^2 \chi \rho \rho_1 - \chi^3 \varepsilon^2 \rho \rho_2 \varepsilon^2 - \chi^2 \rho^2 \varepsilon^2 \rho_1 \rho^2 \varepsilon
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +\chi^2 \rho^2 \varepsilon^2 \rho^2 \rho^2 \varepsilon - 2\chi^3 \rho \varepsilon \rho \rho \varepsilon - \chi^2 \rho^2 \rho \rho \varepsilon + 2\chi \rho^2 \rho^2 \rho^2 \varepsilon \\
& - 4\rho^2 \rho \rho \varepsilon \chi^2 \rho - 2\chi^3 \varepsilon^2 \rho^2 \varepsilon + 2\varepsilon \chi \rho^2 \rho^2 \rho + \chi \rho^2 \rho^2 \rho^2 \varepsilon^2 \\
& + 2\chi^2 \rho \rho \rho^2 \varepsilon + 2\rho^2 \chi \rho \rho^2 - 2\chi^3 \rho \varepsilon \rho^2 \varepsilon + 4\chi^2 \rho^2 \rho^2 \varepsilon \rho^2 \rho \varepsilon \\
& - \chi^3 \rho^2 \rho^2 \varepsilon^2 \rho \rho \varepsilon^2 + 2\chi \rho^2 \rho^2 \rho \rho \varepsilon + 2\chi \rho^2 \rho^2 \rho^2 \rho \rho \varepsilon - \chi^2 \rho \rho^2 \rho^2 \varepsilon^2 \varepsilon \\
& - \chi^2 \rho^2 \rho^2 \rho^2 \varepsilon^2 \varepsilon + \chi^2 \rho^2 \rho^2 \varepsilon^2 \rho \rho \varepsilon - 4\rho^2 \rho^2 \rho \rho^2 - \chi^2 \varepsilon \rho^2 \rho^2 \rho^2 \rho^2 \varepsilon^2 \\
& + \chi^3 \rho^2 \rho^2 \varepsilon^2 \rho \rho \varepsilon^2 + \chi^3 \rho \rho^2 \rho^2 \varepsilon^2 \varepsilon^2 - 2\chi^3 \rho^2 \rho^2 \varepsilon \rho^2 \varepsilon^2 \\
& + 2\chi^2 \rho^2 \rho^2 \varepsilon^2 \rho^2 \varepsilon + \chi^2 \rho^2 \varepsilon \rho^2 \rho^2 \varepsilon^2 + 4\chi^2 \rho^2 \rho^2 \varepsilon \rho^2 \varepsilon \\
& + 2\chi \rho^2 \rho^2 \varepsilon \rho^2 \rho \rho \varepsilon - 4\rho^2 \rho^2 \rho^2 \rho \rho \varepsilon + 2\chi \rho^2 \rho^2 \rho^2 \rho \rho \varepsilon^2 + \chi \rho^2 \rho^2 \rho^2 \rho^2 \rho^2 \varepsilon^2 \\
& - 4\rho^2 \rho^2 \rho^2 \rho^2 \varepsilon + 2\chi \rho^2 \rho^2 \varepsilon \rho \rho \rho \varepsilon + 2\chi^2 \rho^2 \rho^2 \varepsilon^2 \rho^2 \rho \varepsilon \\
& - 4\chi^2 \rho^2 \rho \rho \varepsilon \rho \rho \varepsilon + \rho^2 \varepsilon \chi^2 \rho^2 \rho^2 - 4\chi^2 \rho^2 \rho \rho \varepsilon \rho^2 \varepsilon + \rho^2 \varepsilon^2 \chi^2 \rho^2 \rho^2 \rho^2 \\
& - 4\rho^2 \rho^2 \rho^2 \rho^2 - \varepsilon^2 \chi^2 \rho^2 \rho^2 \rho^2 - 2\varepsilon \chi^3 \rho \rho^2 \rho^2 \varepsilon^2 - \rho^2 \rho \rho \varepsilon \chi^2 \\
& + 2\rho \rho^2 \varepsilon^2 \chi^4 \rho \rho \varepsilon - \rho^2 \rho^2 \rho^2 \chi + \rho^2 \rho^2 \rho^2 \varepsilon \chi^3 \varepsilon^2 + \rho^2 \rho^2 \rho^2 \varepsilon \chi^3 \varepsilon \\
& - 2\rho^2 \varepsilon \chi^3 \rho \rho \varepsilon + 2\rho^2 \rho^2 \rho \rho \chi^2 \varepsilon - 2\rho^2 \rho^2 \varepsilon \chi^3 \varepsilon + \rho^2 \rho^2 \rho^2 \chi^2 \varepsilon^2 \\
& + \rho^2 \rho^2 \rho^2 \varepsilon \chi^2 - \rho^2 \varepsilon^2 \chi^4 \rho^2 \varepsilon^2 - \rho^2 \varepsilon^2 \chi^4 \rho^2 \varepsilon - \rho^2 \chi^2 \rho^2 \rho^2 \rho^2 \varepsilon \\
& - 4\rho^2 \chi^2 \rho \rho^2 \varepsilon + 2\rho^2 \varepsilon^2 \chi^4 \rho \rho \varepsilon - 2\varepsilon^2 \chi^4 \rho \rho^2 \varepsilon - 2\rho^2 \rho^2 \varepsilon \chi^3 \varepsilon^2 \\
& + 2\varepsilon^2 \chi^3 \rho^2 \rho^2 \varepsilon + \varepsilon^2 \chi^5 \rho \rho^2 \varepsilon^2 - 2\rho^2 \varepsilon \chi^3 \rho^2 \rho \rho \varepsilon + \rho^2 \varepsilon \chi^4 \rho^2 \rho^2 \varepsilon^2 \\
& - 2\rho^2 \rho^2 \varepsilon^2 \chi^3 \rho \rho \varepsilon - 2\rho^2 \rho^2 \varepsilon^2 \chi^3 \rho \rho \varepsilon + \rho^2 \rho^2 \rho^2 \varepsilon^2 \chi^3 \varepsilon \\
& + 2\rho \rho^2 \rho^2 \varepsilon^2 \chi^3 \varepsilon + 2\rho^2 \rho^2 \varepsilon \chi^2 - 2\rho^2 \rho^2 \rho^2 \varepsilon \chi^2 \varepsilon - 2\rho^2 \rho^2 \rho \rho \chi \\
& - \rho^2 \chi^2 \rho^2 \rho \rho \varepsilon - 4\rho^2 \chi^2 \rho \rho \rho \varepsilon + \rho^2 \varepsilon^2 \chi^4 \rho \rho \varepsilon^2 - \varepsilon^2 \chi^3 \rho^2 \\
& - \rho \rho^2 \rho^2 \varepsilon^2 \chi^4 \varepsilon^2 + 2\rho^2 \rho^2 \rho^2 \rho^2 \rho^2 \varepsilon - 2\rho^2 \rho^2 \rho^2 \rho^2 \rho^2 \rho^2 \varepsilon + 8\rho^2 \rho^2 \rho^2 \rho^2 \rho \rho \varepsilon \\
& - 2\rho^2 \rho^2 \rho^2 \rho^2 \rho^2 \varepsilon^2 - 2\rho^2 \rho^2 \varepsilon \chi^3 \rho \rho \rho \varepsilon - 2\rho^2 \rho^2 \varepsilon \chi^2 \rho^2 \rho \rho \varepsilon + \varepsilon^2 \chi^4 \rho^2 \rho^2 \varepsilon
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +2\rho_2\rho_1\varepsilon_1\chi^3\rho^2\varepsilon+8\rho_2\rho_1\varepsilon_1\chi^3\rho\varepsilon-\rho\rho_2^2\varepsilon_1\chi^4\varepsilon^2 \\
& -2\varepsilon_1^2\chi^3\rho_1^2\rho\rho_2\varepsilon-4\rho_2^2\varepsilon_1\chi^2\rho\rho_1\varepsilon)=0 \\
\therefore & (\rho_2\varepsilon_1^2\rho_1\varepsilon^2-\varepsilon_1^2\rho_1\varepsilon^2+\varepsilon_1^2\rho\varepsilon^2-\varepsilon_1^2\rho\rho_2\varepsilon^2)\chi^5+(2\rho_2\varepsilon_1\rho_1\varepsilon^2 \\
& -2\rho_2\varepsilon_1^2\rho_1\varepsilon+2\varepsilon_1^2\rho\rho_2\varepsilon+2\rho_2\varepsilon_1\rho_1\rho\varepsilon^2-2\rho\rho_2\varepsilon_1^2\rho_1\varepsilon \\
& +\varepsilon_1^2\rho_1\varepsilon^2-2\rho_2\varepsilon_1\rho\varepsilon^2+\varepsilon_1^2\rho^2\rho_2\varepsilon-\varepsilon_1^2\rho\varepsilon^2-\varepsilon_1^2\rho^2\varepsilon-\varepsilon_1^2\rho^2\varepsilon^2 \\
& +\rho_1^2\varepsilon_1\varepsilon^2+\varepsilon_1^2\rho_1\varepsilon-\rho_2^2\varepsilon_1^2\rho_1\varepsilon^2-\rho_2^2\varepsilon_1\rho_1\varepsilon^2+\rho\rho_2^2\varepsilon_1^2\varepsilon^2 \\
& -\rho_2\varepsilon_1\rho_1^2\varepsilon^2+\varepsilon_1^2\rho_1^2\varepsilon^2-\rho\varepsilon_1^2\varepsilon+\rho_2\varepsilon_1^2\rho^2\varepsilon^2-\rho_2\varepsilon_1^2\rho_1^2\varepsilon^2 \\
& +\rho\rho_2^2\varepsilon_1\varepsilon^2+2\varepsilon_1^2\rho\rho_1\varepsilon-2\varepsilon_1\rho_1\rho\varepsilon^2)\chi^4+(-\rho\rho_2\varepsilon_1^2-\varepsilon_1^2\rho_1^2\varepsilon \\
& +\varepsilon_1^2\rho^2\varepsilon^2-\varepsilon_1^2\rho^2\rho_2+2\varepsilon_1^2\rho_1^2\rho\rho_2\varepsilon+2\rho_2^2\varepsilon_1^2\rho_1\rho\varepsilon-\rho^2\rho_2^2\varepsilon_1\varepsilon \\
& -2\varepsilon_1^2\rho^2\rho_2\varepsilon+2\rho_2^2\varepsilon_1\rho\rho_1\varepsilon-8\rho_2\rho_1\varepsilon_1\rho\varepsilon-2\rho_2\rho_1\varepsilon_1\rho^2\varepsilon \\
& +\varepsilon_1^2\rho^2+\rho_2^2\varepsilon_1^2\rho_1\varepsilon^2-2\rho\rho_2^2\varepsilon_1^2\varepsilon+2\rho\varepsilon_1\rho_2\varepsilon-\rho^2\rho_2^2\varepsilon_1^2\varepsilon \\
& +2\rho_2^2\varepsilon_1^2\rho_1\varepsilon-\rho_2^2\varepsilon_1^2\rho_1\rho\varepsilon^2-\rho\rho_2^2\varepsilon_1^2\varepsilon^2+2\rho_2^2\varepsilon_1\rho_1^2\varepsilon^2 \\
& +2\rho\varepsilon_1\rho_1\varepsilon+\varepsilon_1^2\rho\rho_2\varepsilon^2+2\rho_2\varepsilon_1\rho\varepsilon^2-2\rho_2\varepsilon_1\rho_1\varepsilon^2-\rho_2\varepsilon_1^2\rho_1\varepsilon^2 \\
& -2\rho_2\varepsilon_1\rho_1^2\varepsilon^2+2\rho_2\rho^2\varepsilon_1\varepsilon^2-\varepsilon_1^2\rho\rho_1+2\varepsilon_1^2\rho^2\varepsilon+2\rho_2\rho^2\varepsilon_1\varepsilon \\
& -2\rho_2\varepsilon_1\rho_1\varepsilon-2\rho_2^2\varepsilon_1\rho_1\rho\varepsilon^2+2\varepsilon_1\rho_1\rho\varepsilon^2-\varepsilon_1\rho_1^2\varepsilon-\rho\varepsilon_1^2\rho_1^2\varepsilon^2 \\
& -\rho^2\rho_2\varepsilon_1^2\rho_1\varepsilon^2-\rho_2\varepsilon_1^2\rho^2\varepsilon^2+2\rho^2\varepsilon_1\rho_1\varepsilon-\rho^2\rho_2^2\varepsilon_1\varepsilon^2 \\
& +2\varepsilon_1\rho_1\rho^2\varepsilon^2+2\rho\rho_2\varepsilon_1^2\rho_1\varepsilon^2-\rho_1^2\varepsilon_1\varepsilon^2+\rho_2\rho^2\varepsilon_1^2\rho_1 \\
& +\varepsilon_1^2\rho_1\rho^2\varepsilon^2-\rho_2\varepsilon_1^2\rho_1^2\varepsilon^2-2\rho_1\rho^2\rho_2\varepsilon_1\varepsilon^2+2\varepsilon_1^2\rho\rho_2\rho_1 \\
& -2\rho\rho_2^2\varepsilon_1\varepsilon+2\rho_2\varepsilon_1\rho_1^2\rho\varepsilon+2\rho_2\varepsilon_1^2\rho_1^2\varepsilon-2\rho_1^2\rho\varepsilon_1\varepsilon \\
& +2\rho_2^2\varepsilon_1\rho_1\varepsilon-\varepsilon_1^2\rho_1\rho\varepsilon^2+\rho_2\varepsilon_1^2\rho_1^2\rho\varepsilon^2-2\varepsilon_1^2\rho\rho_1\varepsilon \\
& +2\rho_2\varepsilon_1\rho_1^2\varepsilon+\rho_2^2\varepsilon_1^2\rho_1^2\varepsilon^2-2\rho\varepsilon_1^2\rho_1^2\varepsilon-\varepsilon_1^2\rho^2\rho_1+\rho_2\varepsilon_1^2\rho_1
\end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
& -\rho_2 \rho_1^2 \varepsilon^2 + \rho \rho_2^2 \varepsilon^2 + 2 \rho_2 \rho_1 \rho \varepsilon^2 + \rho \rho_1^2 \varepsilon^2 - \rho_2 \rho_1^2 \rho \varepsilon^2 \\
& - \rho_2^2 \rho_1 \rho \varepsilon^2 - \rho_2^2 \rho_1 \varepsilon^2) \chi^3 + (\rho \varepsilon_1^2 \rho_1^2 + \rho \rho_2^2 \varepsilon_1^2 - 2 \rho^2 \varepsilon_1 \rho_1 \\
& + 2 \rho^2 \rho_2^2 \varepsilon_1 \varepsilon + 2 \rho_2^2 \varepsilon_1 \rho^2 \rho_1 \varepsilon + 2 \rho_2^2 \rho_1^2 \rho \varepsilon^2 - 4 \rho_2^2 \varepsilon_1 \rho_1^2 \varepsilon \\
& + 4 \rho_2^2 \varepsilon_1 \rho \rho_1 \varepsilon - 2 \rho_2^2 \varepsilon_1^2 \rho_1^2 \rho \varepsilon + 4 \rho_2 \rho_1 \varepsilon_1 \rho \varepsilon + 4 \rho_2 \rho_1 \varepsilon_1 \rho^2 \varepsilon \\
& - \rho_2 \varepsilon_1^2 \rho_1^2 \rho^2 - 4 \rho_2^2 \varepsilon_1 \rho_1^2 \rho \varepsilon + \rho \rho_2^2 \varepsilon_1^2 \varepsilon + \rho^2 \rho_2^2 \varepsilon_1^2 \varepsilon \\
& - \rho_2^2 \varepsilon_1^2 \rho_1 \varepsilon + \varepsilon_1 \rho_1^2 \rho^2 \rho_2 \varepsilon^2 - 2 \rho_2^2 \varepsilon_1^2 \rho_1^2 \varepsilon - \rho^2 \varepsilon_1 \rho_1^2 \varepsilon^2 \\
& + \rho_2^2 \varepsilon_1^2 \rho_1 \rho^2 \varepsilon - 2 \rho_2^2 \varepsilon_1^2 \rho_1 \rho + \rho_2^2 \varepsilon_1 \rho_1 \varepsilon^2 - \rho_2 \varepsilon_1^2 \rho_1^2 \\
& + \rho_2 \varepsilon_1 \rho_1^2 \varepsilon^2 - \rho_2 \varepsilon_1^2 \rho_1^2 \rho^2 \varepsilon + 4 \rho_2 \rho_1 \varepsilon_1 \rho - 2 \varepsilon_1 \rho_1^2 \rho_2 \rho \\
& + \varepsilon_1^2 \rho_1^2 \rho^2 + \rho_1^2 \rho \varepsilon_1 - 2 \rho_2 \rho^2 \varepsilon_1 - \rho_2 \varepsilon_1 \rho_1^2 - 2 \rho_2 \rho^2 \varepsilon_1 \varepsilon^2 \\
& - 2 \rho_2^2 \varepsilon_1 \rho \rho_1 - 4 \rho_2 \rho^2 \varepsilon_1 \varepsilon + \rho_2^2 \rho^2 \varepsilon_1 \rho_1 \varepsilon^2 + \rho_2^2 \rho \varepsilon_1 - \rho_2^2 \varepsilon_1^2 \rho_1 \\
& + \rho_2^2 \rho^2 \varepsilon_1 - \rho^2 \rho_1^2 \varepsilon^2 - 2 \rho_2 \rho^2 \rho_1 \varepsilon - 4 \rho^2 \varepsilon_1 \rho_1 \varepsilon + \rho^2 \rho_2^2 \varepsilon_1 \varepsilon^2 \\
& - 2 \varepsilon_1 \rho_1 \rho^2 \varepsilon^2 + \rho_1^2 \rho^2 \rho_2 \varepsilon^2 + \rho_2^2 \varepsilon_1^2 \rho^2 - \rho^2 \rho_2^2 \varepsilon^2 - 2 \varepsilon_1^2 \rho_1^2 \rho \rho_2 \\
& + \rho_2^2 \rho_1 \rho^2 \varepsilon^2 - \rho \rho_2^2 \varepsilon_1 \varepsilon^2 + 4 \rho_2 \varepsilon_1 \rho_1^2 \rho \varepsilon + \rho_2 \varepsilon_1^2 \rho_1^2 \varepsilon \\
& + 4 \rho_1 \rho^2 \rho_2 \varepsilon_1 + 2 \rho_1^2 \rho \varepsilon_1 \varepsilon - \rho_2^2 \rho^2 \varepsilon_1^2 \rho_1 - \rho_2^2 \rho^2 \varepsilon_1 \rho_1 \\
& + \rho \varepsilon_1 \rho_1^2 \varepsilon^2 + \rho^2 \varepsilon_1^2 \rho_1^2 \varepsilon - \varepsilon_1 \rho_1^2 \rho^2 \rho_2 + 2 \rho_2 \varepsilon_1 \rho_1^2 \varepsilon + \rho \varepsilon_1^2 \rho_1^2 \varepsilon \\
& - \rho_2^2 \varepsilon_1 \rho_1 - \rho_2^2 \rho^2 \varepsilon - \rho_2^2 \rho \varepsilon - \rho_1^2 \rho^2 \varepsilon - \rho_1^2 \rho \varepsilon + \rho_1^2 \rho^2 \varepsilon_1 \\
& + \rho_2 \rho_1^2 \varepsilon + \rho_2 \rho_1^2 \varepsilon^2 - \rho \rho_2^2 \varepsilon^2 - 2 \rho_2 \rho_1 \rho \varepsilon^2 - \rho \rho_1^2 \varepsilon^2 + \rho_2^2 \rho_1 \varepsilon^2 \\
& - 2 \rho_2 \rho_1 \rho^2 \varepsilon^2 + 2 \rho_2^2 \rho_1^2 \varepsilon^2 + 4 \rho_2^2 \rho \rho_1 \varepsilon + 4 \rho_1^2 \rho \rho_2 \varepsilon - 2 \rho \rho_1 \rho_2 \varepsilon \\
& + \rho_2^2 \rho^2 \rho_1 \varepsilon + \rho_2^2 \rho_1 \varepsilon + \rho_1^2 \rho^2 \rho_2 \varepsilon) \chi^2 + (-2 \rho_1^2 \rho \rho_2 - 2 \rho_2^2 \rho \rho_1 \\
& - 2 \rho_2^2 \varepsilon_1 \rho^2 \rho_1 \varepsilon - 2 \rho_2^2 \rho_1^2 \rho \varepsilon^2 - \rho_2^2 \rho_1^2 \rho^2 \varepsilon^2 - 2 \rho_2^2 \varepsilon_1 \rho \rho_1 \varepsilon \\
& - 2 \varepsilon_1 \rho_1^2 \rho_2 \rho - 2 \rho_2^2 \varepsilon_1 \rho \rho_1 + \rho_2^2 \varepsilon_1^2 \rho_1^2 \rho^2 + \rho^2 \rho_1^2 \varepsilon^2
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + 4 \rho_2 \rho^2 \rho_1 \varepsilon + \rho_2^2 \varepsilon^2 \rho_1^2 + 2 \rho_2^2 \varepsilon_1 \rho_1^2 + 4 \rho_2^2 \varepsilon_1 \rho_1^2 \rho + \rho^2 \rho_2^2 \varepsilon^2 \\
& + 2 \rho_2^2 \varepsilon_1^2 \rho_1^2 \rho - 2 \rho_2 \varepsilon_1 \rho_1^2 \rho \varepsilon + 2 \rho_2^2 \rho^2 \varepsilon_1 \rho_1^2 - 2 \rho_2^2 \rho^2 \varepsilon_1 \rho_1 \\
& - 2 \varepsilon_1 \rho_1^2 \rho^2 \rho_2 \varepsilon - 2 \varepsilon_1 \rho_1^2 \rho^2 \rho_2 - 2 \rho_1^2 \rho^2 \rho_2 - 2 \rho_2^2 \rho^2 \rho_1 \\
& - 2 \rho_2^2 \rho_1^2 \varepsilon + 2 \rho_2^2 \rho^2 \varepsilon + 2 \rho_1^2 \rho^2 \varepsilon - 8 \rho_2^2 \rho_1^2 \rho \varepsilon - 2 \rho_2^2 \rho_1^2 \rho^2 \varepsilon \\
& + 2 \rho_2 \rho_1 \rho^2 \varepsilon^2 - \rho_2^2 \rho_1^2 \varepsilon^2 - 2 \rho_2^2 \rho \rho_1 \varepsilon - 2 \rho_1^2 \rho \rho_2 \varepsilon - 2 \rho_2^2 \rho^2 \rho_1 \varepsilon \\
& - 2 \rho_1^2 \rho^2 \rho_2 \varepsilon + 2 \rho_2 \rho_1 \rho^2 + \rho^2 \rho_2^2 + \rho^2 \rho_1^2) \chi + 4 \rho_2^2 \rho_1^2 \rho^2 \varepsilon \\
& + 4 \rho_2^2 \rho \rho_1^2 + 4 \rho_2^2 \rho_1^2 \rho^2 + 4 \rho_2^2 \rho_1^2 \rho \varepsilon = 0 \dots (A.1)
\end{aligned}$$

[ Que es la ecuación de valores propios buscada.

**ESTA TESIS NO DEBE  
SALIR DE LA BIBLIOTECA**

## *Apéndice B*

### Listados de los programas utilizados

Los programas utilizados están escritos en los lenguajes de programación propios de los paquetes Mathematica 2.2.2, Enhanced Version y Maple V Release 4, The Power Edition. De la sección B.1 a la B.3 corresponden al Mathematica, mientras que la sección B.4 al Maple.

#### B.1 Ajuste del parámetro $\rho$ en el cristal perfecto.

```
masagalio=SetPrecision[68.94763,40];
masaboro=SetPrecision[10.01612,40];
masafosforo=SetPrecision[30.98361,40];
masaaluminio=SetPrecision[26.99011,40];
masacarbon=SetPrecision[12.00382,40];
masaarsenico=SetPrecision[74.94554,40];
tog=SetPrecision[363,40];
tal=SetPrecision[71,40];
valoreps=masaaluminio/masaarsenico;
cons=2+(4valoreps*tog^4/((1+valoreps)^2tal^2(tal^2-
tog^2)));
laerre=r^2+r*cons+1;
rho=Table[Solve[laerre==0,r]];
inicio=Range[2];
inter=Range[2];
final=Range[2];
nueva=Range[2];
i=1;
While[i<3,
  Print[inicio[[i]]=rho[[i]]]
  Print[inter[[i]]=ToString[inicio[[i]]]]
  Print[final[[i]]=StringReplace[inter[[i]], {r ->
-> }]
  Print[final[[i]]=StringReplace[final[[i]], } ->
]]
```

```

Print[nueva[[i]]=ToExpression[final[[i]]]]
Print[rho[[i]]=nueva[[i]]]
i++
valorrho1=rho[[2]];
ka=(tog^2masaaluminio)/((1+valorrho)(1+valoreps))
tol=Sqrt[(ka/(2masaaluminio))((1+valorrho)(1+valoreps)
+Sqrt[(1+valorrho)^2
(1+valoreps)^2-(16*valorrho*valoreps)])]

tol=SetPrecision[352,40];
tal=SetPrecision[71,40];
c1=(masaaluminio/(1+valoreps))(tal^2+tol^2)-(1+r)k;
c2=(masaaluminio^2)(tol^2-tal^2)^2-
((1+r)^2(1+valoreps)^2-(16r valoreps))k^2;
rho=Table[Solve[{c1==0,c2==0},{k,r}]
ros=Range[5];
i=1;
j=1;
While[i<3,
  las=Table[rho[[i]]];
  Print[ros[[j]]=las[[1]]]
  j++
  Print[ros[[j]]=las[[2]]]
  j++
  i++]
inicio=Range[4];
inter=Range[4];
final=Range[4];
nueva=Range[4];
i=1;
While[i<5,
  Print[inicio[[i]]=ros[[i]]]
  Print[inter[[i]]=ToString[inicio[[i]]]]
  Print[final[[i]]=StringReplace[inter[[i]], r ->
-> ]]
  Print[final[[i]]=StringReplace[final[[i]], k ->
-> ]]
  Print[nueva[[i]]=ToExpression[final[[i]]]]
  Print[ros[[i]]=nueva[[i]]]
  i++]
valorrho2=ros[[3]];
tog=Sqrt[((1+valorrho)(1+valoreps)ka)/masaaluminio]

tog=SetPrecision[363,40];
tol=SetPrecision[352,40];
cons=2+(4valoreps*tog^4/((1+valoreps)^2tol^2(tol^2-
tog^2)));
laerre=r^2+r*cons+1;
rho=Table[Solve[laerre==0,r]];

```

```

inicio=Range[2];
inter=Range[2];
final=Range[2];
nueva=Range[2];
i=1;
While[i<3,
  Print[inicio[[i]]=rho[[i]]]
  Print[inter[[i]]=ToString[inicio[[i]]]]
  Print[final[[i]]=StringReplace[inter[[i]], {r ->
-> }]]
  Print[final[[i]]=StringReplace[final[[i]], } ->
]]
  Print[nueva[[i]]=ToExpression[final[[i]]]]
  Print[rho[[i]]=nueva[[i]]]
  i++]
valorrho3=rho[[2]];
ka=(tog^2masaaluminio)/((1+valorrho)(1+valoreps))
tal=Sqrt[(ka/(2masaaluminio))((1+valorrho)(1+valoreps)
-Sqrt[(1+valorrho)^2
(1+valoreps)^2-(16*valorrho*valoreps)])]

```

## B.2 Ajuste de los parámetros $\rho_1$ y $\rho_2$ .

```

masagalio=SetPrecision[68.94763,40];
masaboro=SetPrecision[10.01612,40];
masafosforo=SetPrecision[30.98361,40];
masaaluminio=SetPrecision[26.99011,40]
masacarbon=SetPrecision[12.00382,40]
masaisocar=SetPrecision[13.00749,40]
masaarsenico=SetPrecision[74.94554,40]
valoreps=masaaluminio/masaarsenico
valoreps1=masacarbon/masaarsenico
valorrho=valorrho1
omegal=SetPrecision[630,40]
omega2=SetPrecision[285,40]
valorexis1=(masaarsenico*omegal^2)/ka
valorexis2=(masaarsenico*omega2^2)/ka
ecuavaloproalas = ecuavalopro;
lineal11=ecuavaloproalas /. rho -> valorrho;
lineal12=lineal11 /. eps -> valoreps;
lineal13=lineal12 /. eps1 -> valoreps1;
fin1=lineal13 /. x -> valorexis1;
fin2=lineal13 /. x -> valorexis2;
lasrho=Table[Solve[{{fin1==0,fin2==0},{rho1,rho2}}]];
ros=Range[17];
i=1;
j=1;
While[i<9,

```

```

        las=Table[lasrho[[i]]];
        Print[ros[[j]]=las[[1]]]
        j++
        Print[ros[[j]]=las[[2]]]
        j++
        i++]
inicio=Range[16];
inter=Range[16];
final=Range[16];
nueva=Range[16];
i=1;
While[i<17,
    Print[inicio[[i]]=ros[[i]]]
    Print[inter[[i]]=ToString[inicio[[i]]]]
    Print[final[[i]]=StringReplace[inter[[i]], rho1
-> -> ]]
    Print[final[[i]]=StringReplace[final[[i]], rho2
-> -> ]]
    Print[nueva[[i]]=ToExpression[final[[i]]]]
    Print[ros[[i]]=nueva[[i]]]
    i++]
i=1;
While[i<17,
    Print[ros[[i]]]
    i++]

```

### B.3 Corrimiento isotópico del parámetro $\epsilon$ .

```

modos1[rho_, rho1_, rho2_, eps_, eps1_]=ecuavaloproalas;
valrho=Range[8];
ecenrho=Range[8];
i=1;
j=2;
k=1;
While[i<17,
    valrho[[k]]=modos1[valorrho, ros[[i]], ros[[j]], va
loreprs, valoreps1];
    ecenrho[[k]]=Solve[valrho[[k]]==0, x];
    j++
    j++
    k++
    i++
    i++]
vexis=Range[41];
i=1;
j=1;
While[i<9,
    las=Table[ecenrho[[i]]];

```

```

Print[vexis[[j]]=las[[1]]]
j++
Print[vexis[[j]]=las[[2]]]
j++
Print[vexis[[j]]=las[[3]]]
j++
Print[vexis[[j]]=las[[4]]]
j++
Print[vexis[[j]]=las[[5]]]
j++
i++]
inicio=Range[40];
inter=Range[40];
final=Range[40];
nueva=Range[40];
i=1;
While[i<41,
  Print[inicio[[i]]=vexis[[i]]]
  Print[inter[[i]]=ToString[inicio[[i]]]]
  Print[final[[i]]=StringReplace[inter[[i]], {x ->
-> }]
  Print[final[[i]]=StringReplace[final[[i]], } ->
]]
  Print[nueva[[i]]=ToExpression[final[[i]]]]
  Print[vexis[[i]]=nueva[[i]]]
  i++]
law[eps_, rho_, x_]=Sqrt[(eps/((eps+1)(rho+1)))x tog^2];
frec=Range[40];
i=1;
While[i<41,
  Print[frec[[i]]=law[valoreps, valorrho, vexis[[i]]]
]]
  i++]
ecuael= ecuaaciondelasel;
omega1=(eps*x^2 -(1+rho)(eps+1)x+2rho)/rho;
ecris=(omega1-Sqrt[omega1*omega1-4])/2;
ecrisper=(omega1+Sqrt[omega1*omega1-4])/2;
dele1[rho_, rho1_, rho2_, eps_, eps1_, x_]=ecuael;
crpto[rho_, eps_, eps1_, x_]=ecrisper;
cris2pto[rho_, eps_, eps1_, x_]=ecris;
elpermas=Range[40];
elpermen=Range[40];
elimperf=Range[321];
i=1;
While[i<41,
  Print[elpermas[[i]]=crpto[valorrho, valoreps, valo
reps1, vexis[[i]]]]
  Print[elpermen[[i]]=cris2pto[valorrho, valoreps, v
aloreps1, vexis[[i]]]]

```

```

        i++]
i=1;
j=2;
k=1;
m=1;
While[i<16,
  l=1;
  While[l<41,

elimperf[[m]]=dele1[valorrh,ros[[i]],ros[[j]],valorep
s,valoreps1,vexis[[1]]]
    m++
    l++]
  j++
  j++
  k++
  i++
  i++]
elsolimp=Range[321];
i=1;
j=2;
While[i<321,
  Print[elsolimp[[i]]=Table[Solve[elimperf[[j]]==0
,e1]]]
    i++
    j++]
vel=Range[641];
i=1;
j=1;
While[i<321,
  las=Table[elsolimp[[i]]];
  Print[vel[[j]]=las[[1]]]
  j++
  Print[vel[[j]]=las[[2]]]
  j++
  i++]
inicio=Range[640];
inter=Range[640];
final=Range[640];
nueva=Range[640];
i=1;
While[i<641,
  Print[inicio[[i]]=vel[[i]]]
  Print[inter[[i]]=ToString[inicio[[i]]]]
  Print[final[[i]]=StringReplace[inter[[i]], {e1 -
> -> }]
  Print[final[[i]]=StringReplace[final[[i]], ) ->
]]
  Print[nueva[[i]]=ToExpression[final[[i]]]]

```



```
Print[vel[[i]]=nueva[[i]]
i++]
```

#### B.4 Programa principal y listado de las subrutinas.

```
restart;
Digits:=80;
#read `d:mate/tesis/gap`;
read `d:mate/tesis/alas`;
read `d:mate/tesis/program`;
res:={};
res:=resol(tog,tol,tal,arsenico,aluminio,carbon,isocar);
#res:=resol(tog,tol,tal,fosforo,galio,boro,isoboro);
*****
read `d:mate/program/tog-tol`;
read `d:mate/program/tog-tal`;
read `d:mate/program/tol-tal`;
read `d:mate/program/las-exis`;
read `d:mate/program/rhol-2`;
read `d:mate/program/lasel`;
read `d:mate/program/ecvalpro`;
read `d:mate/program/ecsdeel`;
read `d:mate/program/discrl`;

resol:= proc(tog,tol,tal,grande,chica,impureza,isoimpureza)
local resol1,resol2,resol3;
    resol1:={};
    resol1:=togtol(tog,tol,grande,chica,impureza,isoimpur
eza);
    resol2:={};
    resol2:=togtal(tog,tal,grande,chica,impureza,isoimpur
eza);
    resol3:={};
    resol3:=toltal(tol,tal,grande,chica,impureza,isoimpur
eza);
    RETURN(resol1,resol2,resol3);
end;
*****
omega1:=630.0;
omega2:=283.0;
aluminio:=26.99011;
carbon:=12.00382;
isocar:=13.00749;
arsenico:=74.94554;
tog:=363.;
tol:=352.;
tal:=71.;
*****
omega1:=593.7;
omega2:=285.0;
galio:=68.94763;
boro:=10.01612;
```

```

isoboro:=11.01281:
fosforo:=30.98361:
tog:=366.0:
tol:=391.0:
tal:=-64.:
*****
togsol:=proc(tog,tol,grande,chica,impureza,iscimpureza)
local imp,iso,r,SM1,SM2,cons,lista,RHOS1,RHOS2,ka,
lar,k,i,j,P,p,pp2,tal,tal1,eps,eps1,SMM1,SMM2;
eps:=grande/chica;
cons:=2+(4*eps*tog^4/((1+eps)^2*tol^2*(tol^2-
tog^2)));
lista:=[solve(r^2+r*cons+1=0,r)];
imp:=impureza;
iso:=iscimpureza;
eps1:=imp/chica;
ka:=(x,tog,grande,eps)->
(tog^2*grande)/((1+x)*(1+eps));
tal[1]:=
sqrt(((tog^2*grande)/((1+lista[1])*(1+eps)))/(2*grande
))*((1+lista[1])
-sqrt((1+lista[1])^2*(1+eps)^2-
(16*lista[1]*eps))));
tal[2]:=
sqrt(((tog^2*grande)/((1+lista[2])*(1+eps)))/(2*grande
))*((1+lista[2])*(1+eps)
-sqrt((1+lista[2])^2*(1+eps)^2-
(16*lista[2]*eps))));
tal:={};
for i from 1 to nops(lista) do
tal1[i]:=
sqrt(((tog^2*grande)/((1+lista[i])*(1+eps)))/(2*grande
))*((1+lista[i])*(1+eps)
-sqrt((1+lista[i])^2*(1+eps)^2-
(16*lista[i]*eps))));
tal:=tal union {tal1[i]};
od;
RHOS1:={};
for i from 1 to nops(lista) do
RHOS2[i]:=[lista[i],ka(lista[i],tog,grande,eps),tog,t
ol,tal[i],(chica*omega^2)/ka(lista[i],tog,grande,eps),
(chica*omega^2)/ka(lista[i],tog,grande,eps)];
RHOS1:=RHOS1 union {RHOS2[i]};
od;
RETURN(RHOS1);
lar:={};
P:={};
SM1:={};
SM2:={};
for i from 1 to nops(lista) do

```

```

        p[i]:=
rhos1(lista[i],(chica*omega2^2)/ka(lista[i],tog,grande,eps),
      (chica*omega2^2)/ka(lista[i],tog,grande,eps),eps,eps1
);
        pp2[i]:= exis(eps, eps1, lista[i], p[i]);
        SMM1[i]:= lasel(eps, lista[i],
imp.chica,p[i],pp2[i]);
        SMM2[i]:= lasel(eps, lista[i],
iso.chica,p[i],pp2[i]);
        SM1:=SM1 union {SMM1[i]};
        SM2:=SM2 union {SMM2[i]};
        P:=P union {p[i]};
        lar:=lar union {pp2[i]};
    od;
    RETURN({togtol1,SM1},{togtol2,SM2});
end;
*****
togtal:=proc(tog,tal,grande,chica,impureza,iscimpureza)
local imp,iso,r,SM1,SM2,cons,lista,RHOS1,RHOS2,ka,
      i,j,P,p,p2,tol,tol1,eps,eps1,SMM1,SMM2,lasr;
      eps:=grande/chica;
      cons:=2+(4*eps*tog^4/((1+eps)^2*tal^2*(tal^2-
tog^2)));
      lista:={solve(r^2+r*cons+1=0,r)};
      imp:=impureza;
      iso:=iscimpureza;
      eps1:=imp/chica;
      ka:=(x,tog,grande,eps)->
      (tog^2*grande)/((1+x)*(1+eps));
      tol[1]:=
sqrt((ka(lista[1],tog,grande,eps)/(2*grande))*((1+lista[1])*
      (1+eps)+
      sqrt((1+lista[1])^2*(1+eps)^2-
      (16*lista[1]*eps))));
      tol[2]:=
sqrt((ka(lista[2],tog,grande,eps)/(2*grande))*((1+lista[2])*
      (1+eps)+
      sqrt((1+lista[2])^2*(1+eps)^2-
      (16*lista[2]*eps))));
      tol:={};
      for i from 1 to nops(lista) do
          toll[i]:=
sqrt((ka(lista[i],tog,grande,eps)/(2*grande))*((1+lista[i])*
      (1+eps)+
          sqrt((1+lista[i])^2*(1+eps)^2-
      (16*lista[i]*eps))));
          tol:=tol union {toll[i]};
      od;
      RHOS1:={};
      for i from 1 to nops(lista) do
          RHOS2[i]:=[lista[i],ka(lista[i],tog,grande,eps),tog,tol
ol[i],tal,(chica*omega2^2)/ka(lista[i],tog,grande,eps),

```

```

(chica*omega2^2)/ka(lista[i],tog,grande,eps)];
RHOS1:=RHOS1 union {RHOS2[i]};
od;
RETURN(RHOS1);
lasr:={};
P:={};
SM1:={};
SM2:={};
for i from 1 to nops(lista) do
  p[i]:=
rhos1(lista[i],(chica*omega1^2)/ka(lista[i],tog,grande,eps),
(chica*omega2^2)/ka(lista[i],tog,grande,eps),eps,eps1
);
  p2:= exis(eps, eps1, lista[i], p[i]);
  SMM1[i]:= lasel(eps, lista[i],
imp,chica,p[i],p2);
  SMM2[i]:= lasel(eps, lista[i],
iso,chica,p[i],p2);
  SM1:=SM1 union {SMM1[i]};
  SM2:=SM2 union {SMM2[i]};
  P:=P union {p[i]};
  lasr:=lasr union {p2};
od;
RETURN({togtal1,SM1},{togtal2,SM2});
end;
*****
total:=proc(tol,tal,grande,chica,impureza,isoimpureza)
local imp,iso,r,SM1,SM2,
cons,lista,RHOS1,RHOS2,ka,pp,lista1,ka1,lis,eq1,eq2,cons1,co
ns2,k,i,j,P,p,p2,
tog,tog1,eps,eps1,SMM1,SMM2,lr;
eps:=grande/chica;
eq1:=(grande/(1+eps))*(tal^2+tol^2)-(1+r)*k;
eq2:=(grande^2)*(tol^2-tal^2)^2-((1+r)^2*(1+eps)^2-
(16*r*eps))*k^2;
lis:=[solve({eq1=0,eq2=0},{r,k})];
pp:={};
for i from 1 to nops(lis) do
  if op(1,op(1,lis[i]))=r
  then pp:=pp union {{op(1,lis[i]), op(2,
lis[i])}} else pp:= pp union
{{op(2,lis[i]), op(1, lis[i])}}
  fi
od;
lista:={};
ka:={};
for i from 1 to nops(lis) do
  lista1[i]:= op(2,op(1,pp[i]));
  ka1[i]:= op(2,op(2,pp[i]));
  lista:=lista union {lista1[i]};
  ka:=ka union {ka1[i]};
od;

```

```

imp:=impureza;
iso:=isoimpureza;
eps1:=imp/chica;
tog[1]:=sqrt(((1+lista[1])*(1+eps)*ka[1])/grande);
tog[2]:=sqrt(((1+lista[2])*(1+eps)*ka[2])/grande);
RHOS1:={};
for i from 1 to nops(lista) do

    RHOS2[i]:=[lista[i],ka[i],tog[i],tol,tal,(chica*omega
1^2)/ka[i],
                (chica*omega2^2)/ka[i]];
    RHOS1:=RHOS1 union {RHOS2[i]};

od;
RETURN(RHOS1);
P:={};
lr:={};
SM1:={};
SM2:={};
for i from 1 to nops(lista) do
    p[i]:= rhol(lista[i],(chica*omega1^2)/ka[i],
                (chica*omega2^2)/ka[i],eps,eps1);
    p2:= exis(eps, eps1, lista[i], p[i]);
    SMM1[i]:= lasel(eps, lista[i],
imp,chica.p[i],p2);
    SMM2[i]:= lasel(eps, lista[i],
iso,chica.p[i],p2);
    SM1:=SM1 union {SMM1[i]};
    SM2:=SM2 union {SMM2[i]};
    P:=P union {p[i]};
    lr:=lr union {p2};

od;
RETURN({toltal1,SM1},{toltal2,SM2});
end;
*****
rhol:=proc(rho, x1, x2, eps, eps1) local S,SS,i,PP;
    S:={solve({ecvalpro(eps,rho,rho1,rho2,x1,eps1)=0,
ecvalpro(eps,rho,rho1,rho2,x2,eps1)=0}, {rho1,rho2})};
    SS:={};
    for i from 1 to nops(S) do
        if coeff(op(2,op(1,S[i])),I)=0 and
            coeff(op(2,op(2,S[i])),I)=0 then
            if op(2,op(1,S[i]))>0 and
op(2,op(2,S[i]))>0
                    then SS:=SS union {S[i]}
            fi
        fi
    od;
    PP:={};
    for i from 1 to nops(SS) do
        if op(1,op(1,SS[i]))=rhol
            then PP:=PP union {[op(1,SS[i]), op(2,
SS[i])]} else PP:= PP union
                {[op(2,SS[i]), op(1, SS[i])]}
        fi
    od;

```

```

        od;
        RETURN(PP);
end;
*****
axis:=proc(eps,eps1,rho,P) local eq,sol,P1,P2,S2,SSS,i,j,PP;
  for i from 1 to nops(P) do
    eq[i]:=ecvalpro(eps,rho,op(2,op(1,P[i])),
      op(2,op(2,P[i])),x,eps1)
    od;
    SSS:={};
    for i from 1 to nops(P) do
      sol[i]:=[P[i],{solve(eq[i]=0,x)}];
      SSS:=SSS union op(2,sol[i]);
    od;
    P1:=[seq(sol[j],j=1..nops(P))];
    S2:=discriminar(SSS);
    P2:={};
    for i from 1 to nops(P) do
      P2:=P2 union {[P[i],discriminar(op(2,sol[i]))]}
    od;
    RETURN(P2);
end;
*****
lasel:=proc(eps, rho, imp,chica,P,P2imp) local
SMI,SMM,SMMI,z,SS,i,j,elimpimp,elimpper,solimpimp,
cont,salida,solimpiso,d1,d2,d3,d4,d5,d6,d7,d8,d9,d10,
c1,c2,c3,c4;
  cont:=1.;
  salida:={};
  SMI:={};
  SMM:={};
  SMMI:={};
  z:=1;
  for i from 1 to nops(P) do
    for j from 1 to nops(op(2,P2imp[i])) do
      elimpimp[z]:=
ecuaelimp(eps,rho,op(2,op(1,P[i])),op(2,op(2,P[i])),
      op(j,op(2,P2imp[i])),imp/chica);
      elimpper[z]:= ecuaelper(eps,rho,
op(j,op(2,P2imp[i])));
      solimpimp[z]:=
[solve(elimpimp[z]=0,e1)];
      solimpiso[z]:=
[solve(elimpper[z]=0,e1)];
      SMMI:=SMMI union {[ [rho,
op(j,op(2,P2imp[i])) ], [op(2,op(1,P[i])),
      op(2,op(2,P[i]))], [solimpimp[z] ,
solimpiso[z] ]]};
      fi;
      z:=z+1;
    od;
  od;
  z:=z-1;
  RETURN(SMMI);

```

```

end;
*****
frontera:=proc(rho,rho1,rho2,chi,epsilon1,E1) local
a1,a2,b2,b3,c1,c2,c3,k0,k1,
k2,xi,yi,xd,yd,cero,l1,l2,l3,l4,eq1,eq2,eq3,eq4,i,signo,eq5,
m1,m2,m3,
m4,p1,p2,p3,p4,p5,p6,p7,p8,p9;
if abs(E1)>=1 then RETURN(infinity) fi;
a1:=(E1*rho+1)*(chi-rho2-rho)+rho*(1+rho-chi)*E1;
a2:=(E1*rho+1)*rho2;
b2:=-rho1*(E1+rho);
b3:=(1+rho-chi)*E1+(chi-rho1-1)*(E1+rho);
c1:=rho2;
c2:=epsilon1*chi-rho1-rho2;
c3:=rho1;
k0:=1.;
k1:=-c3/b3*k0;
k2:=-c1/a1*k0;
xi:= k2*(1+rho*E1)/(1+rho-chi)*E1^(-n-1);
yi:= k2* E1^(-n);
xd:= k1*(rho+E1)/(1+rho-chi)*E1^n;
yd:= k1* E1^n;
cero:=c2-a2*c1/a1-b2*c3/b3;
signo:=E1/abs(E1);
l1:=0;
l2:=0;
l3:=0;
l4:=0;
eq1:=a1*k2+c1*k0;
eq2:=a2*k2+b2*k1+c2*k0;
eq3:=b3*k1+c3*k0;
eq4:=-cero+ eq1+eq2+eq3;
p1 := k2 * E1 ^ 2
p2 := k2 * ((1 + rho * E1) / (1 + rho - chi)) * E1
p3 := k2 * E1
p4 := k2 * ((1 + rho * E1) / (1 + rho - chi))
p5 := k0
p6 := k1 * ((rho + E1) / (1 + rho - chi))
p7 := k1 * E1
p8 := k1 * ((rho + E1) / (1 + rho - chi)) * E1
p9 := k1 * E1 ^ 2
if abs(eq4)>=1 then RETURN(infinity) fi;
RETURN([k0,k1,k2]);
end;
*****

```

# *Apéndice C*

## Técnicas de Espectroscopía

### C.1 Generalidades.

El estudio de espectros permite precisar información acerca de la rotación, vibración y niveles energéticos electrónicos, y de estos niveles energéticos las distancias internucleares, las frecuencias de vibración y las constantes de fuerzas, las energías de disociación, y otros datos acerca de la estructura (Herzberg, 1939). Estos espectros pueden llegar a ser muy complicados, dependiendo de la cantidad de información que contenga en forma simultánea. Para simplificar los análisis, se determinan las simetrías de la configuración de los núcleos, es decir, las posiciones y los tipos de núcleos.

Si este arreglo es regular en un bloque unidad en el espacio de tres dimensiones, y esta celda unitaria se repite infinitamente hasta llenar el espacio, se tiene entonces un cristal perfecto. Sin embargo, en el marco del problema de muchos cuerpos basta con tener cristales del orden de  $[\text{cm}^3]$ .

### C.2 Espectroscopía Raman.

Cuando se dispersa un rayo que esencialmente es de radiación



monocromática por una muestra la cual no absorbe en la longitud de onda del rayo, el espectro de la radiación dispersada incluye una línea en esta longitud de onda y también un número de líneas relativamente débiles (o bandas) en otras longitudes de onda.

Estos espectros pueden ser entendidos como un rayo de radiación formado por un flujo de fotones, los cuales colisionan con las moléculas o átomos de la muestra. La mayor parte de las colisiones son elásticas, así que no hay intercambio de energía y solo se produce una alteración en la trayectoria. La pequeña fracción de colisiones inelásticas son las que ceden algo de la energía a la molécula o, si ya esta excitada, toman parte de la energía de la molécula y esta regresa a su estado base o a un nivel de menor energía.

Los fotones que ganaron energía aumentan su frecuencia y por la relación de D'Broglie, disminuyen su longitud de onda, por lo que dejan de ser importantes en esta espectroscopía.

Sólo son importantes las colisiones en las cuales se transfiere energía del fotón a la molécula, donde ésta solo puede aceptar la cantidad de energía necesaria para permitir la transición de un estado de baja energía a un nivel permitido de excitación. El tipo de nivel de energía mas importante aquí es el vibracional el cual depende de los modos vibracionales de los átomos y moléculas.

Como la energía del fotón es proporcional a su frecuencia, la diferencia entre las frecuencias de los fotones incidentes y los modificados es proporcional a la energía vibracional de las moléculas. En la región del espectro usada las frecuencias no pueden ser medidas directamente, pero las longitudes de onda si. Por lo que la diferencia de las frecuencias esta dada por:

$$\Delta\nu = \frac{c}{\lambda_i} - \frac{c}{\lambda_R} \quad \dots(C.1)$$

en donde  $\lambda_i$  y  $\lambda_R$  representan las longitudes de onda de las líneas incidente y Raman, respectivamente, y  $c$  es la velocidad de la luz. Es convención el expresar la frecuencia como el inverso de la longitud de onda:

$$\Rightarrow \Delta\omega = \frac{\Delta\nu}{c} = \frac{1}{\lambda_i} - \frac{1}{\lambda_R} \quad \dots(C.2)$$

que es el número de ondas por centímetro [ $\text{cm}^{-1}$ ].

La cantidad  $\Delta\omega$  es conocida como el corrimiento o frecuencia Raman, y es independiente de la longitud de onda incidente además de ser una propiedad de las molécula que da la correspondencia con la línea Raman.

El espectro Raman de la muestra, que es el conjunto de los valores  $\Delta\omega$  observados, provee información acerca de los niveles de energía vibracionales de la moléculas en la muestra. Esta información está muy relacionada a la obtenida por el espectro de absorción infrarroja de la muestra la cual es también el resultado de transiciones entre niveles energéticos vibracionales.

### C.3 Espectroscopía Infrarroja.

De acuerdo a la electrodinámica clásica, cualquier movimiento de un sistema atómico que esta conectado con el cambio de su momento dipolar, provoca la emisión o absorción de radiación. Durante el movimiento vibracional de una molécula la distribución de carga sufre un cambio periódico y por

consiguiente, se espera que el momento dipolar cambie periódicamente. Como en la aproximación del oscilador armónico, cualquier movimiento vibracional de la molécula puede ser resuelto como la combinación lineal de vibraciones normales y las vibraciones normales son solo movimientos periódicos simples, las frecuencias normales son las frecuencias que son absorbidas y emitidas por la molécula. Estas frecuencias se localizan en la región cercana al infrarrojo. Normalmente en el infrarrojo se encuentra el espectro de absorción que se observa.

De esta manera, la radiación emitida por un cuerpo se explica como la emisión de cuerpo negro según la ley de radiación de Planck. De acuerdo a esta ley, existe una longitud de onda máxima  $\lambda_m$ , que aplicada a los semiconductores se logra por calentamiento eléctrico mediante conducción directa.

#### C.4 Espectroscopía con Neutrones de Baja Energía.

Los neutrones de baja energía, es decir, los neutrones térmicos o subtérmicos, son una prueba para el estudio de la dinámica molecular en sólidos y líquidos. De entre los varios modos moleculares, la traslación y rotación del centro de masa son de particular interés, pues tiene la mayor dependencia con las fuerzas intermoleculares y el estado físico del medio.

Como la energía de los neutrones es comparable con las vibraciones de la red cristalina y las rotaciones moleculares, esos movimientos pueden ser observados con relativa sencillez y estudiados en detalle mediante colisiones inelásticas.

Otra característica de la prueba es que la masa de los neutrones es del mismo orden a la masa del núcleo dispersado. Por lo que la longitud de onda de

D'Broglie asociada con el momento transferido es comparable con la distancia interatómica en materia condensada y la dispersada es entonces sensible a la estructura del sistema. Toda esta información queda contenida en los espectros, así que *normalmente* son muy complicados y requieren de grandes análisis para su interpretación.

En los experimentos de dispersión inelástica, se observa la variación de la intensidad de la dispersión con la energía de los neutrones y la transferencia de momento. Expresando la transferencia de momento y energía en términos de la frecuencia  $\omega$  y el vector de onda  $\kappa$ , se tiene una función que sólo depende de  $\omega$  y  $\kappa$ . Las cuales permiten la comparación de los neutrones con otras técnicas espectroscópicas (figura C.1).

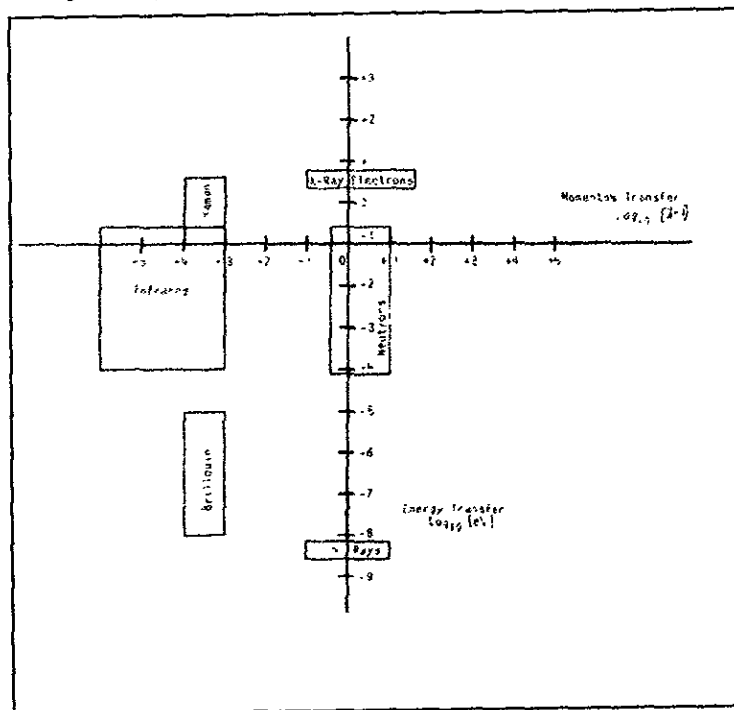


Fig. C.1. Comparación de la dispersión de neutrones con otras técnicas (Boutin, 1968).

En esta figura no se considera la interacción entre la radiación y el medio, por lo que la comparación es solo en forma cualitativa. Sin embargo, es útil señalar que las energías relevantes en los sistemas moleculares son del orden de  $10^{-3}$ ~ $10^{-1}$  eV. y las longitudes de onda son del orden de  $10^{-8}$  cm.

Al comparar las técnicas de dispersión inelástica de neutrones con la absorción infrarroja o Raman, se debe reconocer la diferencia de las interacciones involucradas en los dos procesos, aunque básicamente se pueden medir las mismas propiedades dinámicas con las técnicas.

Como cada método se desarrolla en una región distinta de frecuencias y longitudes de onda, es natural que la información que se derive sea complementaria una de la otra y solo coincidan en casos especiales.

## Apéndice D

### Tablas de fonones localizados

#### D.1 Fosforo de Galio.

En las tablas siguientes se muestran los fonones localizados obtenidos para los posibles ajustes tanto en el modelo del cristal perfecto como del modelo de imperfección, los cuales se presentan de la siguiente manera:

$\omega_{TO_L}$  y  $\omega_{TA_L}$  ( $\rho=31.64$ );  $\omega_{TO_r}$  y  $\omega_{TA_L}$  ( $\rho=26.83$ );  $\omega_{TO_r}$  y  $\omega_{TO_L}$  ( $\rho=5.71$ ).

Para cada uno de estos ajustes se seleccionaron las frecuencias de calibración de la siguiente manera:

$$\begin{array}{ll} \bullet \left\{ \begin{array}{l} \omega_1 = 593.7\text{cm}^{-1} \\ \omega_2 = 571.0\text{cm}^{-1} \end{array} \right. & \bullet \left\{ \begin{array}{l} \omega_1 = 571.0\text{cm}^{-1} \\ \omega_2 = 285.0\text{cm}^{-1} \end{array} \right. \\ \bullet \left\{ \begin{array}{l} \omega_1 = 593.7\text{cm}^{-1} \\ \omega_2 = 285.0\text{cm}^{-1} \end{array} \right. & \bullet \left\{ \begin{array}{l} \omega_1 = 571.0\text{cm}^{-1} \\ \omega_2 = 283.5\text{cm}^{-1} \end{array} \right. \\ \bullet \left\{ \begin{array}{l} \omega_1 = 593.7\text{cm}^{-1} \\ \omega_2 = 283.5\text{cm}^{-1} \end{array} \right. & \bullet \left\{ \begin{array}{l} \omega_1 = 285.0\text{cm}^{-1} \\ \omega_2 = 283.5\text{cm}^{-1} \end{array} \right. \end{array}$$

Donde en cada tabla se presenta la combinación de parámetros  $\rho$ ,  $\rho_1$  y  $\rho_2$ . Las  $\chi$ 's que cumplen los criterios y son así solución, con su respectiva frecuencia " $\omega$ " en unidades de [ $\text{cm}^{-1}$ ] y su rapidez de localización " $E_1$ ".

$\rho = 31.64$	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 25.13 \\ \rho_2 = 1.03 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} \chi_1 = 1.90 \\ \chi_2 = 105.54 \end{array} \right. \Rightarrow$	$\omega = 79.48$
			$E_1 = -2.62 \times 10^{-1}$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 25.29 \\ \rho_2 = 1.03 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} \chi_1 = 1.90 \\ \chi_2 = 106.23 \end{array} \right. \Rightarrow$	$\omega = 79.50$
			$E_1 = -2.61 \times 10^{-1}$
$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 18.26 \\ \rho_2 = 10.41 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} \chi_1 = 7.96 \\ \chi_2 = 50.12 \end{array} \right. \Rightarrow$	$\omega = 162.51$	
		$E_1 = -5.01 \times 10^{-2}$	
$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 17.99 \\ \rho_2 = 10.62 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} \chi_1 = 8.02 \\ \chi_2 = 50.06 \end{array} \right. \Rightarrow$	$\omega = 407.81$	
		$E_1 = 8.45 \times 10^{-2}$	
		$\chi_3 = 106.23 \Rightarrow$	$\omega = 593.7$
			$E_1 = 2.26 \times 10^{-3}$
		$\chi_3 = 105.96 \Rightarrow$	$\omega = 163.13$
			$E_1 = -4.97 \times 10^{-2}$
			$\omega = 407.60$
			$E_1 = 8.59 \times 10^{-2}$
			$\omega = 592.96$
			$E_1 = 2.27 \times 10^{-3}$

Tabla D.1a. Modos localizados para el caso  $\omega_{\text{TO}_L}$  y  $\omega_{\text{TA}_L}$  con  $^{10}\text{B}$ ,  
con el ajuste  $\omega_1 = 593.7\text{cm}^{-1}$ ,  $\omega_2 = 571.0\text{cm}^{-1}$ .

$\rho = 31.64$	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 25.13 \\ \rho_2 = 1.03 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.87 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 78.81 \\ E_1 = -2.69 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 98.26 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 571.00 \\ E_1 = 2.82 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 25.29 \\ \rho_2 = 1.03 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.87 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 78.82 \\ E_1 = -2.69 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 98.89 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 572.84 \\ E_1 = 2.77 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 18.26 \\ \rho_2 = 10.41 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 7.89 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 161.86 \\ E_1 = -5.04 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 49.90 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 406.90 \\ E_1 = 9.10 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
		$\chi_3 = 98.49 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 571.68 \\ E_1 = 2.80 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 17.99 \\ \rho_2 = 10.62 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 7.96 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 162.50 \\ E_1 = -5.01 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 49.83 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 406.62 \\ E_1 = 9.31 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
		$\chi_3 = 98.26 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 571.00 \\ E_1 = 2.82 \times 10^{-3} \end{array} \right.$

Tabla D.1b. Corrimiento isotópico de los modos localizados para el caso  $\omega_{\text{TO}_L}$  y  $\omega_{\text{TA}_L}$  con  $^{11}\text{B}$ , con el ajuste  $\omega_1 = 593.7\text{cm}^{-1}$ ,  $\omega_2 = 571.0\text{cm}^{-1}$ .



$\rho = 31.64$	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 5.37 \\ \rho_2 = 0.97 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.83 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 77.91 \\ E_1 = -2.80 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 24.48 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 285.0 \\ E_1 = -2.68 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 8.04 \\ \rho_2 = 18.74 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 7.53 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 158.15 \\ E_1 = -5.25 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 42.76 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 376.66 \\ E_1 = -8.62 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
		$\chi_3 = 106.23 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 593.70 \\ E_1 = -2.26 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 22.23 \\ \rho_2 = 1.05 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.92 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 79.88 \\ E_1 = -2.57 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
	$\chi_2 = 93.77 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 557.82 \\ E_1 = 3.24 \times 10^{-3} \end{array} \right.$	
$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 25.28 \\ \rho_2 = 1.04 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.91 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 79.74 \\ E_1 = -2.59 \times 10^{-1} \end{array} \right.$	
	$\chi_2 = 106.23 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 593.70 \\ E_1 = 2.26 \times 10^{-3} \end{array} \right.$	
$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 54.12 \\ \rho_2 = 722.90 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 24.48 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 285.00 \\ E_1 = -2.68 \times 10^{-2} \end{array} \right.$	
	$\chi_2 = 106.23 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 593.7 \\ E_1 = 2.26 \times 10^{-3} \end{array} \right.$	
	$\chi_3 = 3096.80 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 3205.58 \\ E_1 = 1.51 \times 10^{-1} \end{array} \right.$	

Tabla D.2a. Modos localizados para el caso  $\omega_{TO_L}$  y  $\omega_{TA_L}$  con  $^{10}\text{B}$ , con el ajuste  $\omega_1 = 593.7\text{cm}^{-1}$ ,  $\omega_2 = 285.0\text{cm}^{-1}$ .

$\rho = 31.64$	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 5.37 \\ \rho_2 = 0.97 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 181 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 77.33 \\ E_1 = -2.87 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 22.74 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 274.73 \\ E_1 = -2.68 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 8.04 \\ \rho_2 = 18.74 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 7.53 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 158.07 \\ E_1 = -5.26 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 41.74 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 372.17 \\ E_1 = -7.01 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
		$\chi_3 = 99.76 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 575.33 \\ E_1 = 2.70 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 22.23 \\ \rho_2 = 1.05 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 189 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 79.21 \\ E_1 = -2.64 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 87.29 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 538.19 \\ E_1 = 4.04 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 25.28 \\ \rho_2 = 1.04 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 188 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 79.06 \\ E_1 = -2.67 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
	$\chi_2 = 98.89 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 572.84 \\ E_1 = 2.77 \times 10^{-3} \end{array} \right.$	
$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 54.12 \\ \rho_2 = 722.90 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 24.38 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 284.45 \\ E_1 = -2.68 \times 10^{-2} \end{array} \right.$	
	$\chi_2 = 105.00 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 590.27 \\ E_1 = 2.34 \times 10^{-3} \end{array} \right.$	
	$\chi_3 = 2880.58 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 3091.65 \\ E_1 = 1.74 \times 10^{-1} \end{array} \right.$	

Tabla D.2b. Corrimiento isotópico de los modos localizados para el caso  $\omega_{TO_L}$  y  $\omega_{TA_L}$  con  $^{11}\text{B}$ , con el ajuste  $\omega_1 = 593.7\text{cm}^{-1}$ ,  $\omega_2 = 285.0\text{cm}^{-1}$ .

$\rho = 31.64$	$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 = 25.28 \\ \rho_2 = 1.04 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.92 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 79.76 \\ E_1 = -2.58 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 106.23 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 593.70 \\ E_1 = 2.26 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
	$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 = 55.34 \\ \rho_2 = 451.13 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 24.32 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 284.07 \\ E_1 = -2.68 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 106.23 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 593.70 \\ E_1 = 2.26 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
		$\chi_3 = 1989.52 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 2569.35 \\ E_1 = 3.67 \times 10^{-6} \end{array} \right.$
	$\rho = 31.64$	$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 = 5.76 \\ \rho_2 = 0.97 \end{array} \right.$
$\chi_2 = 26.06 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 294.07 \\ E_1 = -2.71 \times 10^{-2} \end{array} \right.$		
$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 = 8.62 \\ \rho_2 = 18.37 \end{array} \right.$		$\chi_1 = 7.77 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 160.52 \\ E_1 = -5.11 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
	$\chi_2 = 43.37 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 379.37 \\ E_1 = -1.01 \times 10^{-1} \end{array} \right.$	
	$\chi_3 = 106.23 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 593.70 \\ E_1 = 2.26 \times 10^{-3} \end{array} \right.$	
$\rho = 31.64$	$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 = 22.03 \\ \rho_2 = 1.06 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.93 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 79.93 \\ E_1 = -2.57 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 92.97 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 555.41 \\ E_1 = 3.33 \times 10^{-3} \end{array} \right.$

Tabla D.3a. Modos localizados para el caso  $\omega_{\text{TO}_L}$  y  $\omega_{\text{TA}_L}$  con  $^{10}\text{B}$ , con el ajuste  $\omega_1 = 593.7\text{cm}^{-1}$ ,  $\omega_2 = 283.5\text{cm}^{-1}$ .

$\rho = 31.64$	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 25.28 \\ \rho_2 = 1.04 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.88 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 79.08 \\ E_1 = -2.66 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 98.89 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 572.84 \\ E_1 = 2.77 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 55.34 \\ \rho_2 = 451.13 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 24.22 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 283.50 \\ E_1 = -2.68 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 105.11 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 590.60 \\ E_1 = 2.32 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
		$\chi_3 = 1848.93 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 2476.91 \\ E_1 = 4.27 \times 10^{-6} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 5.76 \\ \rho_2 = 0.97 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.80 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 77.36 \\ E_1 = -2.87 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
	$\chi_2 = 24.22 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 283.50 \\ E_1 = -2.68 \times 10^{-2} \end{array} \right.$	
$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 8.62 \\ \rho_2 = 18.37 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 7.76 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 160.43 \\ E_1 = -5.12 \times 10^{-2} \end{array} \right.$	
	$\chi_2 = 42.40 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 375.07 \\ E_1 = -7.96 \times 10^{-2} \end{array} \right.$	
	$\chi_3 = 99.67 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 575.08 \\ E_1 = 2.71 \times 10^{-3} \end{array} \right.$	
$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 22.03 \\ \rho_2 = 1.06 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.89 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 779.26 \\ E_1 = -2.64 \times 10^{-1} \end{array} \right.$	
	$\chi_2 = 86.54 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 535.86 \\ E_1 = 4.15 \times 10^{-3} \end{array} \right.$	

Tabla D.3b. Corrimiento isotópico de los modos localizados para el caso  $\omega_{TO_L}$  y  $\omega_{TA_L}$  con  $^{11}\text{B}$ , con el ajuste  $\omega_1 = 593.7\text{cm}^{-1}$ ,  $\omega_2 = 283.5\text{cm}^{-1}$ .

$\rho = 31.64$	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 22.67 \\ \rho_2 = 1.05 \end{array} \right.$	$\left. \begin{array}{l} \chi_1 = 1.92 \Rightarrow \\ \chi_2 = 95.54 \Rightarrow \end{array} \right\}$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 79.86 \\ E_1 = -2.57 \times 10^{-1} \\ \omega = 563.05 \\ E_1 = -3.07 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 25.11 \\ \rho_2 = 1.04 \end{array} \right.$	$\left. \begin{array}{l} \chi_1 = 1.92 \Rightarrow \\ \chi_2 = 105.54 \Rightarrow \end{array} \right\}$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 79.74 \\ E_1 = -2.59 \times 10^{-1} \\ \omega = 591.79 \\ E_1 = -2.30 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 5.37 \\ \rho_2 = 0.97 \end{array} \right.$	$\left. \begin{array}{l} \chi_1 = 1.83 \Rightarrow \\ \chi_2 = 24.48 \Rightarrow \end{array} \right\}$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 77.92 \\ E_1 = -2.80 \times 10^{-1} \\ \omega = 285.00 \\ E_1 = -2.68 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 8.05 \\ \rho_2 = 18.33 \end{array} \right.$	$\left. \begin{array}{l} \chi_1 = 7.49 \Rightarrow \\ \chi_2 = 42.74 \Rightarrow \\ \chi_3 = 104.61 \Rightarrow \end{array} \right\}$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 157.70 \\ E_1 = 5.28 \times 10^{-2} \\ \omega = 376.60 \\ E_1 = -8.59 \times 10^{-2} \\ \omega = 589.15 \\ E_1 = 2.36 \times 10^{-3} \end{array} \right.$

Tabla D.4a. Modos localizados para el caso  $\omega_{\text{TO}_L}$  y  $\omega_{\text{TA}_L}$  con  $^{10}\text{B}$ , con el ajuste  $\omega_1 = 571.0\text{cm}^{-1}$ ,  $\omega_2 = 285.0\text{cm}^{-1}$ .

$\rho = 31.64$	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 22.67 \\ \rho_2 = 1.05 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.89 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 79.18 \\ E_1 = -2.65 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 88.94 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 543.24 \\ E_1 = -3.81 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 25.11 \\ \rho_2 = 1.04 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.88 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 79.07 \\ E_1 = -2.66 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 98.26 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 571.00 \\ E_1 = 2.82 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 5.37 \\ \rho_2 = 0.97 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.80 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 77.35 \\ E_1 = -2.87 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
	$\chi_2 = 22.74 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 274.73 \\ E_1 = -2.68 \times 10^{-2} \end{array} \right.$	
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 8.05 \\ \rho_2 = 18.33 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 7.48 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 157.62 \\ E_1 = -5.28 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 41.72 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 372.08 \\ E_1 = -6.98 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
		$\chi_3 = 98.26 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 571.00 \\ E_1 = 2.82 \times 10^{-3} \end{array} \right.$

Tabla D.4b. Corrimiento isotópico de los modos localizados para el caso  $\omega_{TO_L}$  y  $\omega_{TA_L}$  con  $^{11}\text{B}$ , con el ajuste  $\omega_1 = 571.0\text{cm}^{-1}$ ,  $\omega_2 = 285.0\text{cm}^{-1}$ .

	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 5.75 \\ \rho_2 = 0.97 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.83 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 77.96 \\ E_1 = -2.79 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 26.06 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 294.07 \\ E_1 = -2.71 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 48.92 \\ \rho_2 = 1715.13 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 24.30 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 283.98 \\ E_1 = -2.68 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 99.54 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 574.71 \\ E_1 = 2.72 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
		$\chi_3 = 7143.92 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 4868.76 \\ E_1 = -2.80 \times 10^{-7} \end{array} \right.$
$\rho = 31.64$	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 25.11 \\ \rho_2 = 1.04 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.92 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 79.77 \\ E_1 = -2.58 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 105.55 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 591.80 \\ E_1 = 2.30 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 22.46 \\ \rho_2 = 1.05 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.92 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 79.91 \\ E_1 = -2.57 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 94.71 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 560.59 \\ E_1 = 3.15 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 8.62 \\ \rho_2 = 17.99 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 7.72 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 160.06 \\ E_1 = -5.14 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 43.37 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 379.34 \\ E_1 = -1.01 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_3 = 104.70 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 589.43 \\ E_1 = 2.35 \times 10^{-3} \end{array} \right.$

Tabla D.5a. Modos localizados para el caso  $\omega_{TO_L}$  y  $\omega_{TA_L}$  con  $^{10}\text{B}$ , con el ajuste  $\omega_1 = 571.0\text{cm}^{-1}$ ,  $\omega_2 = 283.5\text{cm}^{-1}$ .

	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 5.75 \\ \rho_2 = 0.97 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.80 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 77.38 \\ E_1 = -2.87 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 24.22 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 283.50 \\ E_1 = -2.68 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 48.92 \\ \rho_2 = 1715.13 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 24.22 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 283.50 \\ E_1 = -2.68 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 98.26 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 571.00 \\ E_1 = 2.82 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
		$\chi_3 = 6651.43 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 4868.76 \\ E_1 = 3.23 \times 10^{-7} \end{array} \right.$
$\rho = 31.64$	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 25.11 \\ \rho_2 = 1.04 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.89 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 79.09 \\ E_1 = -2.66 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 98.26 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 571.00 \\ E_1 = 2.82 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 22.46 \\ \rho_2 = 1.05 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.89 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 79.23 \\ E_1 = -2.65 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 88.16 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 540.86 \\ E_1 = 3.92 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 8.62 \\ \rho_2 = 17.99 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 7.71 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 159.96 \\ E_1 = -5.15 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 42.38 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 375.01 \\ E_1 = -7.93 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_3 = 98.26 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 571.00 \\ E_1 = 2.35 \times 10^{-3} \end{array} \right.$

Tabla D.5b. Corrimiento isotópico de los modos localizados para el caso  $\omega_{\text{TO}_L}$  y  $\omega_{\text{TA}_L}$  con  $^{11}\text{B}$ , con el ajuste  $\omega_1 = 571.0\text{cm}^{-1}$ ,  $\omega_2 = 283.5\text{cm}^{-1}$ .



$\rho = 31.64$	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 5.50 \\ \rho_2 = 0.73 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.66 \Rightarrow$	$\left\langle \begin{array}{l} \omega = 74.20 \\ E_1 = -2.80 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 24.48 \Rightarrow$	$\left\langle \begin{array}{l} \omega = 285.0 \\ E_1 = -2.68 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 5.96 \\ \rho_2 = 0.60 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.57 \Rightarrow$	$\left\langle \begin{array}{l} \omega = 72.07 \\ E_1 = -3.76 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 26.02 \Rightarrow$	$\left\langle \begin{array}{l} \omega = 293.86 \\ E_1 = -2.71 \times 10^{-2} \end{array} \right.$

Tabla D.6a. Modos localizados para el caso  $\omega_{TO_L}$  y  $\omega_{TA_L}$  con  $^{10}\text{B}$ , con el ajuste  $\omega_1 = 285.0\text{cm}^{-1}$ ,  $\omega_2 = 2883.5\text{cm}^{-1}$ .

$\rho = 31.64$	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 5.50 \\ \rho_2 = 0.73 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.63 \Rightarrow$	$\left\langle \begin{array}{l} \omega = 73.64 \\ E_1 = -2.80 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 22.77 \Rightarrow$	$\left\langle \begin{array}{l} \omega = 274.86 \\ E_1 = -2.68 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 5.96 \\ \rho_2 = 0.60 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.54 \Rightarrow$	$\left\langle \begin{array}{l} \omega = 71.52 \\ E_1 = -3.89 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 24.22 \Rightarrow$	$\left\langle \begin{array}{l} \omega = 283.50 \\ E_1 = -2.68 \times 10^{-2} \end{array} \right.$

Tabla D.6b. Corrimiento isotópico de los modos localizados para el caso  $\omega_{TO_L}$  y  $\omega_{TA_L}$  con  $^{11}\text{B}$ , con el ajuste  $\omega_1 = 285.0\text{cm}^{-1}$ ,  $\omega_2 = 2883.5\text{cm}^{-1}$ .

$\rho = 26.83$	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 25.11 \\ \rho_2 = 1.01 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.89 \Rightarrow \left\langle \begin{array}{l} \omega = 79.23 \\ E_1 = -2.65 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 105.45 \Rightarrow \left\langle \begin{array}{l} \omega = 591.79 \\ E_1 = 1.75 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 25.28 \\ \rho_2 = 1.01 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.89 \Rightarrow \left\langle \begin{array}{l} \omega = 79.25 \\ E_1 = -2.66 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 106.14 \Rightarrow \left\langle \begin{array}{l} \omega = 593.70 \\ E_1 = 1.72 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
$\rho = 26.83$	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 16.54 \\ \rho_2 = 12.30 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 8.29 \Rightarrow \left\langle \begin{array}{l} \omega = 165.95 \\ E_1 = -5.00 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 43.58 \Rightarrow \left\langle \begin{array}{l} \omega = 380.44 \\ E_1 = 7.32 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
		$\chi_3 = 106.13 \Rightarrow \left\langle \begin{array}{l} \omega = 593.70 \\ E_1 = 1.72 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
$\rho = 26.83$	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 16.32 \\ \rho_2 = 12.46 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 8.32 \Rightarrow \left\langle \begin{array}{l} \omega = 166.19 \\ E_1 = -4.99 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 43.52 \Rightarrow \left\langle \begin{array}{l} \omega = 380.15 \\ E_1 = 7.46 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
		$\chi_3 = 105.94 \Rightarrow \left\langle \begin{array}{l} \omega = 593.14 \\ E_1 = 1.73 \times 10^{-3} \end{array} \right.$

Tabla D.7a. Modos localizados para el caso  $\omega_{\text{TO}_F}$  y  $\omega_{\text{TA}_L}$  con  $^{10}\text{B}$ ,  
con el ajuste  $\omega_1 = 593.7\text{cm}^{-1}$ ,  $\omega_2 = 571.0\text{cm}^{-1}$ .

	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 25.11 \\ \rho_2 = 1.01 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.86 \Rightarrow \left\langle \begin{array}{l} \omega = 78.56 \\ E_1 = -2.73 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 98.17 \Rightarrow \left\langle \begin{array}{l} \omega = 571.00 \\ E_1 = 2.11 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 25.28 \\ \rho_2 = 1.01 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.86 \Rightarrow \left\langle \begin{array}{l} \omega = 78.57 \\ E_1 = -2.73 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 98.81 \Rightarrow \left\langle \begin{array}{l} \omega = 572.84 \\ E_1 = 2.08 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
$\rho = 26.83$	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 16.54 \\ \rho_2 = 12.30 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 8.23 \Rightarrow \left\langle \begin{array}{l} \omega = 165.40 \\ E_1 = -5.02 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 43.35 \Rightarrow \left\langle \begin{array}{l} \omega = 379.45 \\ E_1 = 7.83 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
		$\chi_3 = 98.35 \Rightarrow \left\langle \begin{array}{l} \omega = 571.50 \\ E_1 = 2.10 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 16.32 \\ \rho_2 = 12.46 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 8.26 \Rightarrow \left\langle \begin{array}{l} \omega = 165.66 \\ E_1 = -5.02 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 43.27 \Rightarrow \left\langle \begin{array}{l} \omega = 379.11 \\ E_1 = 8.01 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
		$\chi_3 = 98.17 \Rightarrow \left\langle \begin{array}{l} \omega = 571.00 \\ E_1 = 2.11 \times 10^{-3} \end{array} \right.$

Tabla D.7b. Corrimiento isotópico de los modos localizados para el caso  $\omega_{\text{TO}_r}$  y  $\omega_{\text{TA}_L}$  con  $^{11}\text{B}$ , con el ajuste  $\omega_1 = 593.7\text{cm}^{-1}$ ,  $\omega_2 = 571.0\text{cm}^{-1}$ .

	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 19.97 \\ \rho_2 = 1.05 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.92 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 79.77 \\ E_1 = -2.60 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 84.50 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 529.74 \\ E_1 = 3.21 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 25.27 \\ \rho_2 = 1.03 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.90 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 79.51 \\ E_1 = -2.63 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 106.14 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 593.70 \\ E_1 = 1.72 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
$\rho = 26.83$	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 7.69 \\ \rho_2 = 19.37 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 7.29 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 155.59 \\ E_1 = -5.58 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 37.24 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 351.70 \\ E_1 = -1.35 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_3 = 106.14 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 593.70 \\ E_1 = -1.72 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 351.30 \\ \rho_2 = 0.99 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.88 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 78.98 \\ E_1 = -2.68 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 1440.57 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 2187.28 \\ E_1 = 5.98 \times 10^{-6} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 5.37 \\ \rho_2 = 0.97 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.83 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 77.89 \\ E_1 = -2.81 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 24.48 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 285.00 \\ E_1 = -3.31 \times 10^{-2} \end{array} \right.$

Tabla D.8a. Modos localizados para el caso  $\omega_{TO_r}$  y  $\omega_{TA_L}$  con  $^{10}B$ , con el ajuste  $\omega_1 = 593.7\text{cm}^{-1}$ ,  $\omega_2 = 285.0\text{cm}^{-1}$ .

$\rho = 26.83$	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 19.97 \\ \rho_2 = 1.05 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} \chi_1 = 1.88 \\ \chi_2 = 78.65 \end{array} \right. \Rightarrow$	$\omega = 79.10$
			$E_1 = -2.67 \times 10^{-1}$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 25.27 \\ \rho_2 = 1.03 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} \chi_1 = 1.87 \\ \chi_2 = 98.81 \end{array} \right. \Rightarrow$	$\omega = 511.08$
			$E_1 = 3.97 \times 10^{-3}$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 7.69 \\ \rho_2 = 19.37 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} \chi_1 = 7.28 \\ \chi_2 = 36.49 \\ \chi_3 = 99.33 \end{array} \right. \Rightarrow$	$\omega = 78.84$
			$E_1 = -2.70 \times 10^{-1}$
$E_1 = 2.08 \times 10^{-3}$			
$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 351.30 \\ \rho_2 = 0.99 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} \chi_1 = 1.84 \\ \chi_2 = 1341.98 \end{array} \right. \Rightarrow$	$\omega = 155.53$	
		$E_1 = -5.58 \times 10^{-2}$	
$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 5.37 \\ \rho_2 = 0.97 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} \chi_1 = 1.80 \\ \chi_2 = 22.73 \end{array} \right. \Rightarrow$	$\omega = 348.11$	
		$E_1 = -1.05 \times 10^{-1}$	
$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 5.37 \\ \rho_2 = 0.97 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} \chi_1 = 1.80 \\ \chi_2 = 22.73 \end{array} \right. \Rightarrow$	$\omega = 574.36$	
		$E_1 = 2.05 \times 10^{-3}$	
$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 351.30 \\ \rho_2 = 0.99 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} \chi_1 = 1.84 \\ \chi_2 = 1341.98 \end{array} \right. \Rightarrow$	$\omega = 78.29$	
		$E_1 = -2.77 \times 10^{-2}$	
$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 5.37 \\ \rho_2 = 0.97 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} \chi_1 = 1.80 \\ \chi_2 = 22.73 \end{array} \right. \Rightarrow$	$\omega = 2111.11$	
		$E_1 = 6.90 \times 10^{-6}$	
$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 5.37 \\ \rho_2 = 0.97 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} \chi_1 = 1.80 \\ \chi_2 = 22.73 \end{array} \right. \Rightarrow$	$\omega = 77.32$	
		$E_1 = -2.89 \times 10^{-1}$	
$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 5.37 \\ \rho_2 = 0.97 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} \chi_1 = 1.80 \\ \chi_2 = 22.73 \end{array} \right. \Rightarrow$	$\omega = 274.77$	
		$E_1 = -3.21 \times 10^{-2}$	

Tabla D.8b. Corrimiento isotópico de los modos localizados para el caso  $\omega_{\text{TO}_r}$  y  $\omega_{\text{TA}_L}$  con  $^{11}\text{B}$ , con el ajuste  $\omega_1 = 593.7\text{cm}^{-1}$ ,  $\omega_2 = 285.0\text{cm}^{-1}$ .

$\rho = 26.83$	$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 = 25.27 \\ \rho_2 = 1.03 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.87 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 78.86 \\ E_1 = -2.70 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 98.81 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 572.84, \\ E_1 = 2.08 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
	$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 = 567.90 \\ \rho_2 = 0.99 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.85 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 78.29 \\ E_1 = -2.76 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 2167.97 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 2683.27 \\ E_1 = 2.61 \times 10^{-6} \end{array} \right.$
	$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 = 5.76 \\ \rho_2 = 0.97 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.80 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 77.35 \\ E_1 = -2.88 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 24.20 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 283.50 \\ E_1 = -3.29 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
	$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 = 8.21 \\ \rho_2 = 19.03 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 7.49 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 157.79 \\ E_1 = -5.44 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 37.03 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 350.68 \\ E_1 = -1.24 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_3 = 99.26 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 574.15 \\ E_1 = 2.05 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
	$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 = 19.79 \\ \rho_2 = 1.05 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.85 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 78.29 \\ E_1 = -2.41 \times 10^{-1} \end{array} \right.$

Tabla D.9b. Corrimiento isotópico de los modos localizados para el caso  $\omega_{TO_r}$  y  $\omega_{TA_L}$  con  $^{11}\text{B}$ , con el ajuste  $\omega_1 = 593.7\text{cm}^{-1}$ ,  $\omega_2 = 283.5\text{cm}^{-1}$ .

$\rho = 26.83$	$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 = 7.68 \\ \rho_2 = 19.06 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 7.26 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 155.29 \\ E_1 = -5.60 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 37.24 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 351.69 \\ E_1 = -1.35 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_3 = 104.88 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 590.19 \\ E_1 = 1.77 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
	$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 = 240.34 \\ \rho_2 = 0.99 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.87 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 79.86 \\ E_1 = -2.57 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 986.36 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 1809.90 \\ E_1 = 1.29 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
	$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 = 25.10 \\ \rho_2 = 1.03 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.90 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 79.52 \\ E_1 = -2.63 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
$\chi_2 = 105.46 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 591.79 \\ E_1 = 1.74 \times 10^{-3} \end{array} \right.$		
$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 = 5.37 \\ \rho_2 = 0.97 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.83 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 77.91 \\ E_1 = -2.81 \times 10^{-1} \end{array} \right.$	
	$\chi_2 = 24.46 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 285.00 \\ E_1 = -3.31 \times 10^{-2} \end{array} \right.$	
$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 = 20.32 \\ \rho_2 = 1.05 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.91 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 79.75 \\ E_1 = -2.60 \times 10^{-1} \end{array} \right.$	
	$\chi_2 = 85.94 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 534.24 \\ E_1 = -3.06 \times 10^{-3} \end{array} \right.$	

Tabla D.10a. Modos localizados para el caso  $\omega_{TO_r}$  y  $\omega_{TA_L}$  con  $^{10}\text{B}$ , con el ajuste  $\omega_1 = 571.0\text{cm}^{-1}$ ,  $\omega_2 = 285.0\text{cm}^{-1}$ .

$\rho = 26.83$	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 7.68 \\ \rho_2 = 19.06 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 7.26 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 155.22 \\ E_1 = -5.60 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 36.48 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 348.08 \\ E_1 = -1.05 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_3 = 98.17 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 571.00 \\ E_1 = 2.11 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 240.34 \\ \rho_2 = 0.99 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.85 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 78.30 \\ E_1 = -2.76 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 918.83 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 1746.85 \\ E_1 = 1.49 \times 10^{-5} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 25.10 \\ \rho_2 = 1.03 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.87 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 78.84 \\ E_1 = -2.70 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
	$\chi_2 = 98.17 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 571.00 \\ E_1 = 2.11 \times 10^{-3} \end{array} \right.$	
$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 5.37 \\ \rho_2 = 0.97 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.80 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 77.34 \\ E_1 = -2.88 \times 10^{-1} \end{array} \right.$	
	$\chi_2 = 22.73 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 274.77 \\ E_1 = -3.21 \times 10^{-2} \end{array} \right.$	
$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 20.32 \\ \rho_2 = 1.05 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.88 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 79.08 \\ E_1 = -2.68 \times 10^{-1} \end{array} \right.$	
	$\chi_2 = 79.99 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 515.42 \\ E_1 = -3.77 \times 10^{-3} \end{array} \right.$	

Tabla D.10b. Corrimiento isotópico de los modos localizados para el caso  $\omega_{\text{TO}_r}$  y  $\omega_{\text{TA}_L}$  con  $^{11}\text{B}$ , con el ajuste  $\omega_1 = 571.0\text{cm}^{-1}$ ,  $\omega_2 = 285.0\text{cm}^{-1}$ .



$\rho = 26.83$	$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 = 5.76 \\ \rho_2 = 0.97 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} \chi_1 = 1.83 \\ \chi_2 = 26.03 \end{array} \right. \Rightarrow$	$\omega = 77.95$
			$E_1 = -2.81 \times 10^{-1}$
	$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 = 320.79 \\ \rho_2 = 0.99 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} \chi_1 = 1.88 \\ \chi_2 = 1315.67 \end{array} \right. \Rightarrow$	$\omega = 294.02$
			$E_1 = -3.47 \times 10^{-2}$
	$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 = 25.10 \\ \rho_2 = 1.03 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} \chi_1 = 1.90 \\ \chi_2 = 105.46 \end{array} \right. \Rightarrow$	$\omega = 79.54$
			$E_1 = -2.63 \times 10^{-1}$
$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 = 20.13 \\ \rho_2 = 1.05 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} \chi_1 = 1.92 \\ \chi_2 = 85.17 \end{array} \right. \Rightarrow$	$\omega = 591.79$	
		$E_1 = 1.75 \times 10^{-3}$	
$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 = 8.21 \\ \rho_2 = 18.74 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} \chi_1 = 7.48 \\ \chi_2 = 37.76 \end{array} \right. \Rightarrow$	$\omega = 79.79$	
		$E_1 = -2.60 \times 10^{-1}$	
$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 = 8.21 \\ \rho_2 = 18.74 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} \chi_2 = 37.76 \\ \chi_3 = 104.96 \end{array} \right. \Rightarrow$	$\omega = 531.84$	
		$E_1 = 3.14 \times 10^{-3}$	
		$\omega = 157.57$	
			$E_1 = -5.46 \times 10^{-2}$
			$\omega = 354.11$
			$E_1 = -1.69 \times 10^{-1}$
			$\omega = 590.42$
			$E_1 = 1.77 \times 10^{-3}$

Tabla D.11a. Modos localizados para el caso  $\omega_{\text{TOR}}$  y  $\omega_{\text{TAL}}$  con  $^{10}\text{B}$ ,  
con el ajuste  $\omega_1 = 571.0\text{cm}^{-1}$ ,  $\omega_2 = 283.5\text{cm}^{-1}$ .

$\rho = 26.83$	$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 = 5.76 \\ \rho_2 = 0.97 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} \chi_1 = 1.80 \\ \chi_2 = 24.20 \end{array} \right. \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 77.37 \\ E_1 = -2.88 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
			$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 283.50 \\ E_1 = -3.29 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
	$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 = 320.79 \\ \rho_2 = 0.99 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} \chi_1 = 1.85 \\ \chi_2 = 1225.62 \end{array} \right. \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 78.30 \\ E_1 = -2.76 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
			$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 2017.51 \\ E_1 = -8.30 \times 10^{-6} \end{array} \right.$
	$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 = 25.10 \\ \rho_2 = 1.03 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} \chi_1 = 1.87 \\ \chi_2 = 98.17 \end{array} \right. \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 78.86 \\ E_1 = -2.70 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
			$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 571.00 \\ E_1 = 2.11 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 = 20.13 \\ \rho_2 = 1.05 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} \chi_1 = 1.88 \\ \chi_2 = 79.28 \end{array} \right. \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 79.13 \\ E_1 = -2.67 \times 10^{-1} \end{array} \right.$	
		$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 513.11 \\ E_1 = 3.88 \times 10^{-3} \end{array} \right.$	
$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 = 8.21 \\ \rho_2 = 18.74 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} \chi_1 = 7.47 \\ \chi_2 = 37.03 \\ \chi_3 = 98.17 \end{array} \right. \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 157.47 \\ E_1 = -5.46 \times 10^{-2} \end{array} \right.$	
		$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 350.67 \\ E_1 = -1.24 \times 10^{-1} \end{array} \right.$	
		$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 571.00 \\ E_1 = 2.11 \times 10^{-3} \end{array} \right.$	

Tabla D.11b. Corrimiento isotópico de los modos localizados para el caso  $\omega_{TO_r}$  y  $\omega_{TA_1}$  con  $^{11}\text{B}$ , con el ajuste  $\omega_1 = 5710\text{cm}^{-1}$ ,  $\omega_2 = 283.5\text{cm}^{-1}$ .

$\rho = 26.83$	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 5.51 \\ \rho_2 = 0.71 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.65 \Rightarrow$	$\left\langle \begin{array}{l} \omega = 73.92 \\ E_1 = -3.40 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 24.46 \Rightarrow$	$\left\langle \begin{array}{l} \omega = 285.00 \\ E_1 = -3.31 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 5.99 \\ \rho_2 = 0.54 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.53 \Rightarrow$	$\left\langle \begin{array}{l} \omega = 71.25 \\ E_1 = -3.96 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 25.99 \Rightarrow$	$\left\langle \begin{array}{l} \omega = 293.81 \\ E_1 = -3.46 \times 10^{-2} \end{array} \right.$

Tabla D.12a. Modos localizados para el caso  $\omega_{\text{TO}_r}$  y  $\omega_{\text{TA}_L}$  con  $^{10}\text{B}$ , con el ajuste  $\omega_1 = 285.0\text{cm}^{-1}$ ,  $\omega_2 = 2883.5\text{cm}^{-1}$ .

$\rho = 26.83$	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 5.51 \\ \rho_2 = 0.71 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.62 \Rightarrow$	$\left\langle \begin{array}{l} \omega = 73.35 \\ E_1 = -3.40 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 22.75 \Rightarrow$	$\left\langle \begin{array}{l} \omega = 274.89 \\ E_1 = -3.31 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 5.99 \\ \rho_2 = 0.54 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.51 \Rightarrow$	$\left\langle \begin{array}{l} \omega = 70.72 \\ E_1 = -4.10 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 24.20 \Rightarrow$	$\left\langle \begin{array}{l} \omega = 283.50 \\ E_1 = -3.29 \times 10^{-2} \end{array} \right.$

Tabla D.12b. Corrimiento isotópico de los modos localizados para el caso  $\omega_{\text{TO}_r}$  y  $\omega_{\text{TA}_L}$  con  $^{11}\text{B}$ , con el ajuste  $\omega_1 = 285.0\text{cm}^{-1}$ ,  $\omega_2 = 2883.5\text{cm}^{-1}$ .

$\rho = 5.71$	$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 = 4.67 \\ \rho_2 = 1.15 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.88 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 171.89 \\ E_1 = -2.88 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 22.35 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 592.57 \\ E_1 = 8.94 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
	$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 = 4.69 \\ \rho_2 = 1.16 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.89 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 172.15 \\ E_1 = -2.61 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 22.44 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 593.70 \\ E_1 = 8.84 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 = 3.83 \\ \rho_2 = 2.22 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 2.37 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 193.14 \\ E_1 = -2.18 \times 10^{-2} \end{array} \right.$	
	$\chi_2 = 22.44 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 593.70 \\ E_1 = 8.85 \times 10^{-2} \end{array} \right.$	
$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 = 3.79 \\ \rho_2 = 2.26 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 2.39 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 193.70 \\ E_1 = -2.16 \times 10^{-2} \end{array} \right.$	
	$\chi_2 = 22.39 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 593.12 \\ E_1 = 8.90 \times 10^{-2} \end{array} \right.$	

Tabla D.13a. Modos localizados para el caso  $\omega_{\text{TO}_r}$  y  $\omega_{\text{TO}_L}$  con  $^{10}\text{B}$ , con el ajuste  $\omega_1 = 593.7\text{cm}^{-1}$ ,  $\omega_2 = 571.0\text{cm}^{-1}$ .

$\rho = 5.71$	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 4.67 \\ \rho_2 = 1.15 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} \chi_1 = 1.85 \\ \chi_2 = 20.75 \end{array} \right. \Rightarrow$	$\omega = 171.89$
			$E_1 = -2.95 \times 10^{-1}$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 4.69 \\ \rho_2 = 1.16 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} \chi_1 = 1.86 \\ \chi_2 = 20.83 \end{array} \right. \Rightarrow$	$\omega = 170.96$
			$E_1 = -2.93 \times 10^{-1}$
$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 3.83 \\ \rho_2 = 2.22 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} \chi_1 = 2.35 \\ \chi_2 = 20.79 \end{array} \right. \Rightarrow$	$\omega = 192.21$	
		$E_1 = -2.20 \times 10^{-2}$	
$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 3.79 \\ \rho_2 = 2.26 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} \chi_1 = 2.37 \\ \chi_2 = 20.75 \end{array} \right. \Rightarrow$	$\omega = 192.79$	
		$E_1 = -2.19 \times 10^{-2}$	
			$\omega = 571.00$
			$E_1 = 1.10 \times 10^{-2}$

Tabla D.13b. Corrimiento isotópico de los modos localizados para el caso  $\omega_{\text{TO}_r}$  y  $\omega_{\text{TO}_L}$  con  $^{11}\text{B}$ , con el ajuste  $\omega_1 = 593.7\text{cm}^{-1}$ ,  $\omega_2 = 571.0\text{cm}^{-1}$ .

$\rho = 5.71$	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 0.73 \\ \rho_2 = 0.88 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.64 \Rightarrow$	$\omega = 160.40$
			$E_1 = -3.56 \times 10^{-1}$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 2.52 \\ \rho_2 = 3.45 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 2.55 \Rightarrow$	$\omega = 285.00$
			$E_1 = -1.42 \times 10^{-2}$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 4.15 \\ \rho_2 = 1.35 \end{array} \right.$	$\chi_2 = 22.44 \Rightarrow$	$\omega = 200.10$
			$E_1 = -2.03 \times 10^{-1}$
$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 4.61 \\ \rho_2 = 1.27 \end{array} \right.$	$\chi_2 = 20.82 \Rightarrow$	$\omega = 593.70$	
		$E_1 = 8.85 \times 10^{-3}$	
$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 4.61 \\ \rho_2 = 1.27 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.95 \Rightarrow$	$\omega = 176.59$	
		$E_1 = -2.69 \times 10^{-1}$	
$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 4.61 \\ \rho_2 = 1.27 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.95 \Rightarrow$	$\omega = 571.93$	
		$E_1 = 1.09 \times 10^{-3}$	
$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 4.61 \\ \rho_2 = 1.27 \end{array} \right.$	$\chi_2 = 22.44 \Rightarrow$	$\omega = 175.13$	
		$E_1 = -2.75 \times 10^{-1}$	
$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 4.61 \\ \rho_2 = 1.27 \end{array} \right.$	$\chi_2 = 22.44 \Rightarrow$	$\omega = 593.70$	
		$E_1 = 8.85 \times 10^{-3}$	

Tabla D.14a. Modos localizados para el caso  $\omega_{\text{TO}_r}$  y  $\omega_{\text{TO}_L}$  con  $^{10}\text{B}$ ,  
con el ajuste  $\omega_1 = 593.7\text{cm}^{-1}$ ,  $\omega_2 = 285.0\text{cm}^{-1}$ .

$\rho = 5.71$	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 0.73 \\ \rho_2 = 0.88 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.62 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 159.85 \\ E_1 = -3.61 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 4.80 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 274.74 \\ E_1 = -1.41 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 2.52 \\ \rho_2 = 3.45 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 2.54 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 199.65 \\ E_1 = -2.04 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 8.52 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 365.91 \\ E_1 = -8.97 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 4.15 \\ \rho_2 = 1.35 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.96 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 175.46 \\ E_1 = -2.73 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 19.32 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 550.93 \\ E_1 = 1.35 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 4.61 \\ \rho_2 = 1.27 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.93 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 173.96 \\ E_1 = -2.79 \times 10^{-1} \end{array} \right.$	
	$\chi_2 = 20.82 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 571.97 \\ E_1 = 1.09 \times 10^{-2} \end{array} \right.$	

Tabla D.14b. Corrimiento isotópico de los modos localizados para el caso  $\omega_{\text{TO}_r}$  y  $\omega_{\text{TO}_L}$  con  $^{11}\text{B}$ , con el ajuste  $\omega_1 = 593.7\text{cm}^{-1}$ ,  $\omega_2 = 285.0\text{cm}^{-1}$ .

$\rho = 5.71$	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 4.11 \\ \rho_2 = 1.37 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 2.00 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 177.20 \\ E_1 = -2.67 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 20.77 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 571.25 \\ E_1 = 1.10 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 4.60 \\ \rho_2 = 1.29 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.96 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 175.49 \\ E_1 = -2.73 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 22.44 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 593.70 \\ E_1 = 8.85 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 0.82 \\ \rho_2 = 0.88 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.65 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 160.80 \\ E_1 = -3.53 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 5.50 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 293.84 \\ E_1 = -1.45 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 2.63 \\ \rho_2 = 3.36 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 2.55 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 200.34 \\ E_1 = -2.03 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 22.44 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 593.70 \\ E_1 = 8.85 \times 10^{-3} \end{array} \right.$

Tabla D.15a. Modos localizados para el caso  $\omega_{\text{TO}_r}$  y  $\omega_{\text{TO}_l}$  con  $^{10}\text{B}$ ,  
con el ajuste  $\omega_1 = 593.7\text{cm}^{-1}$ ,  $\omega_2 = 283.5\text{cm}^{-1}$ .



$\rho = 5.71$	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 4.11 \\ \rho_2 = 1.37 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.97 \Rightarrow$	$\left\langle \begin{array}{l} \omega = 176.08 \\ E_1 = -2.71 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 19.27 \Rightarrow$	$\left\langle \begin{array}{l} \omega = 550.26 \\ E_1 = 1.36 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 4.60 \\ \rho_2 = 1.29 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.93 \Rightarrow$	$\left\langle \begin{array}{l} \omega = 174.31 \\ E_1 = -2.78 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 20.82 \Rightarrow$	$\left\langle \begin{array}{l} \omega = 571.95 \\ E_1 = 1.09 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 0.82 \\ \rho_2 = 0.88 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.63 \Rightarrow$	$\left\langle \begin{array}{l} \omega = 160.19 \\ E_1 = -3.58 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 5.11 \Rightarrow$	$\left\langle \begin{array}{l} \omega = 283.50 \\ E_1 = -1.42 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 2.63 \\ \rho_2 = 3.36 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 2.54 \Rightarrow$	$\left\langle \begin{array}{l} \omega = 199.85 \\ E_1 = -2.03 \times 10^{-1} \end{array} \right.$	
	$\chi_2 = 20.87 \Rightarrow$	$\left\langle \begin{array}{l} \omega = 572.66 \\ E_1 = 1.08 \times 10^{-2} \end{array} \right.$	

Tabla D.15b. Corrimiento isotópico de los modos localizados para el caso  $\omega_{\text{TO}_c}$  y  $\omega_{\text{TO}_L}$  con  $^{11}\text{B}$ , con el ajuste  $\omega_1 = 593.7\text{cm}^{-1}$ ,  $\omega_2 = 283.5\text{cm}^{-1}$ .

$\rho = 5.71$	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 4.58 \\ \rho_2 = 1.28 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.95 \Rightarrow$	$\left\langle \begin{array}{l} \omega = 175.19 \\ E_1 = -2.74 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 22.36 \Rightarrow$	$\left\langle \begin{array}{l} \omega = 592.70 \\ E_1 = -8.93 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 4.22 \\ \rho_2 = 1.33 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.98 \Rightarrow$	$\left\langle \begin{array}{l} \omega = 176.33 \\ E_1 = -2.70 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 21.06 \Rightarrow$	$\left\langle \begin{array}{l} \omega = 575.17 \\ E_1 = 1.05 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 0.73 \\ \rho_2 = 0.89 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.64 \Rightarrow$	$\left\langle \begin{array}{l} \omega = 160.45 \\ E_1 = -3.56 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 5.17 \Rightarrow$	$\left\langle \begin{array}{l} \omega = 285.00 \\ E_1 = -1.42 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 2.52 \\ \rho_2 = 3.41 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 2.54 \Rightarrow$	$\left\langle \begin{array}{l} \omega = 199.85 \\ E_1 = -2.03 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 22.29 \Rightarrow$	$\left\langle \begin{array}{l} \omega = 591.81 \\ E_1 = 9.00 \times 10^{-3} \end{array} \right.$

Tabla D.16a. Modos localizados para el caso  $\omega_{\text{TO}_r}$  y  $\omega_{\text{TO}_L}$  con  $^{10}\text{B}$ ,  
con el ajuste  $\omega_1 = 571.0\text{cm}^{-1}$ ,  $\omega_2 = 285.0\text{cm}^{-1}$ .

$\rho = 5.71$	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 4.58 \\ \rho_2 = 1.28 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} \chi_1 = 1.93 \\ \chi_2 = 20.75 \end{array} \right. \Rightarrow$	$\omega = 174.01$
			$E_1 = -2.79 \times 10^{-1}$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 4.22 \\ \rho_2 = 1.33 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} \chi_1 = 1.95 \\ \chi_2 = 19.54 \end{array} \right. \Rightarrow$	$\omega = 175.19$
			$E_1 = -2.74 \times 10^{-1}$
$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 0.73 \\ \rho_2 = 0.89 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} \chi_1 = 1.63 \\ \chi_2 = 4.80 \end{array} \right. \Rightarrow$	$\omega = 554.06$	
		$E_1 = 1.30 \times 10^{-3}$	
$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 2.52 \\ \rho_2 = 3.41 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} \chi_1 = 2.53 \\ \chi_2 = 22.75 \end{array} \right. \Rightarrow$	$\omega = 159.90$	
		$E_1 = -3.60 \times 10^{-1}$	
			$\omega = 274.74$
			$E_1 = -1.41 \times 10^{-1}$
			$\omega = 199.39$
			$E_1 = -2.04 \times 10^{-1}$
			$\omega = 571.00$
			$E_1 = 1.10 \times 10^{-3}$

Tabla D.16b. Corrimiento isotópico de los modos localizados para el caso  $\omega_{\text{TO}_r}$  y  $\omega_{\text{TO}_l}$  con  $^{11}\text{B}$ , con el ajuste  $\omega_1 = 571.0\text{cm}^{-1}$ ,  $\omega_2 = 285.0\text{cm}^{-1}$ .

$\rho = 5.71$	$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 = 0.82 \\ \rho_2 = 0.89 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.65 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 160.86 \\ E_1 = -3.53 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 5.50 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 293.84 \\ E_1 = -1.44 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
	$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 = 4.58 \\ \rho_2 = 1.29 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.96 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 175.55 \\ E_1 = -2.73 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 22.36 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 592.71 \\ E_1 = 8.93 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
	$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 = 4.18 \\ \rho_2 = 1.36 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.99 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 176.91 \\ E_1 = -2.68 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 21.00 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 574.38 \\ E_1 = 1.06 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 = 2.63 \\ \rho_2 = 3.32 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 2.54 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 200.08 \\ E_1 = -2.03 \times 10^{-1} \end{array} \right.$	
	$\chi_2 = 22.31 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 591.99 \\ E_1 = 8.99 \times 10^{-3} \end{array} \right.$	

Tabla D.17a. Modos localizados para el caso  $\omega_{TO_r}$  y  $\omega_{TO_l}$  con  $^{10}\text{B}$ , con el ajuste  $\omega_1 = 571.0\text{cm}^{-1}$ ,  $\omega_2 = 283.5\text{cm}^{-1}$ .

$\rho = 5.71$	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 0.82 \\ \rho_2 = 0.89 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.63 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 160.25 \\ E_1 = -3.58 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 5.12 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 283.50 \\ E_1 = -1.42 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 4.58 \\ \rho_2 = 1.29 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.93 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 174.37 \\ E_1 = -2.78 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 20.75 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 571.00 \\ E_1 = 1.10 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 4.18 \\ \rho_2 = 1.36 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.97 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 175.78 \\ E_1 = -2.72 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 19.48 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 553.27 \\ E_1 = 1.32 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 2.63 \\ \rho_2 = 3.32 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 2.53 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 199.59 \\ E_1 = -2.04 \times 10^{-1} \end{array} \right.$	
	$\chi_2 = 20.75 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 571.00 \\ E_1 = 1.10 \times 10^{-2} \end{array} \right.$	

Tabla D.17b. Corrimiento isotópico de los modos localizados para el caso  $\omega_{\text{TO}_r}$  y  $\omega_{\text{TO}_l}$  con  $^{11}\text{B}$ , con el ajuste  $\omega_1 = 571.0\text{cm}^{-1}$ ,  $\omega_2 = 283.5\text{cm}^{-1}$ .

$\rho = 5.71$	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 1.10 \\ \rho_2 = 0.32 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.39 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 147.83 \\ E_1 = -4.94 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 5.48 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 293.32 \\ E_1 = -1.44 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_3 = 8.48 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 365.01 \\ E_1 = -6.98 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 0.96 \\ \rho_2 = 0.45 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.46 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 151.52 \\ E_1 = -4.14 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 5.17 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 285.00 \\ E_1 = -1.42 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 8.53 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 366.00 \\ E_1 = -9.84 \times 10^{-1} \end{array} \right.$

Tabla D.18a. Modos localizados para el caso  $\omega_{TO_r}$  y  $\omega_{TO_l}$  con  $^{10}\text{B}$ , con el ajuste  $\omega_1 = 285.0\text{cm}^{-1}$ ,  $\omega_2 = 2883.5\text{cm}^{-1}$ .

$\rho = 5.71$	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 1.10 \\ \rho_2 = 0.32 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.37 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 147.69 \\ E_1 = -5.14 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 5.12 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 283.50 \\ E_1 = -1.42 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_3 = 8.47 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 364.86 \\ E_1 = -6.81 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 0.96 \\ \rho_2 = 0.45 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.44 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 150.45 \\ E_1 = -4.55 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 4.82 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 275.18 \\ E_1 = -1.41 \times 10^{-1} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 8.52 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 365.96 \\ E_1 = -9.26 \times 10^{-1} \end{array} \right.$

Tabla D.18b. Corrimiento isotópico de los modos localizados para el caso  $\omega_{TO_r}$  y  $\omega_{TO_l}$  con  $^{11}\text{B}$ , con el ajuste  $\omega_1 = 285.0\text{cm}^{-1}$ ,  $\omega_2 = 2883.5\text{cm}^{-1}$ .

$\begin{cases} \rho_1 = 2 \\ \rho_2 = 22.5 \end{cases}$	$\left[ \rho = 26.83 \right]$	$\chi_1 = 3.29 \Rightarrow \begin{cases} \omega = 104.60 \\ E_1 = -1.25 \times 10^{-1} \end{cases}$
		$\chi_2 = 31.43 \Rightarrow \begin{cases} \omega = 323.08 \\ E_1 = -4.72 \times 10^{-2} \end{cases}$
		$\chi_2 = 105.58 \Rightarrow \begin{cases} \omega = 592.15 \\ E_1 = 1.74 \times 10^{-2} \end{cases}$
$\begin{cases} \rho_1 = 2 \\ \rho_2 = 22.5 \end{cases}$	$\left[ \rho = 31.64 \right]$	$\chi_1 = 3.30 \Rightarrow \begin{cases} \omega = 104.73 \\ E_1 = -1.23 \times 10^{-1} \end{cases}$
		$\chi_2 = 36.07 \Rightarrow \begin{cases} \omega = 345.96 \\ E_1 = -3.78 \times 10^{-2} \end{cases}$
		$\chi_3 = 107.90 \Rightarrow \begin{cases} \omega = 598.37 \\ E_1 = 2.16 \times 10^{-3} \end{cases}$

Tabla D.19a. Modos localizados con la variación de la " $\rho_1$ " y " $\rho_2$ " con cada " $\rho$ " para el  $^{10}\text{B}$ .

$\begin{cases} \rho_1 = 2 \\ \rho_2 = 22.5 \end{cases}$	$\left[ \rho = 26.83 \right]$	$\chi_1 = 3.29 \Rightarrow \begin{cases} \omega = 104.59 \\ E_1 = -1.25 \times 10^{-1} \end{cases}$
		$\chi_2 = 30.53 \Rightarrow \begin{cases} \omega = 318.45 \\ E_1 = -4.39 \times 10^{-2} \end{cases}$
		$\chi_2 = 99.62 \Rightarrow \begin{cases} \omega = 575.20 \\ E_1 = 2.03 \times 10^{-2} \end{cases}$
$\begin{cases} \rho_1 = 2 \\ \rho_2 = 22.5 \end{cases}$	$\left[ \rho = 31.64 \right]$	$\chi_1 = 3.30 \Rightarrow \begin{cases} \omega = 104.71 \\ E_1 = -1.23 \times 10^{-1} \end{cases}$
		$\chi_2 = 34.91 \Rightarrow \begin{cases} \omega = 340.33 \\ E_1 = -3.52 \times 10^{-2} \end{cases}$
		$\chi_3 = 102.21 \Rightarrow \begin{cases} \omega = 598.37 \\ E_1 = 2.52 \times 10^{-3} \end{cases}$

Tabla D.19b. Corrimiento isotópico de los modos localizados con la variación de la " $\rho_1$ " y " $\rho_2$ " con cada " $\rho$ " para el  $^{11}\text{B}$ .

## D.2 Arsenuro de Aluminio.

En las tablas siguientes se muestran los fonones localizados obtenidos para la calibración propuesta en el modelo de imperfección, los cuales corresponden a los tres posibles ajustes del cristal perfecto, presentándose de la siguiente manera:

1.  $\omega_{TO_L}$  y  $\omega_{TA_L}$  ( $\rho = 18.67$ ).

2.  $\omega_{TO_r}$  y  $\omega_{TA_L}$  ( $\rho = 19.11$ ).

3.  $\omega_{TO_r}$  y  $\omega_{TO_L}$  ( $\rho = 11.78$ ).



$\rho = 11.78$	$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 = 2.73 \\ \rho_2 = 0.95 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.61 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 110.73 \\ E_1 = -0.266 \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 10.57 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 283.0 \\ E_1 = -6.70 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
	$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 = 71.01 \\ \rho_2 = 0.98 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.66 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 112.21 \\ E_1 = -0.256 \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 232.52 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 1327.18 \\ E_1 = 8.48 \times 10^{-5} \end{array} \right.$
	$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 = 15.52 \\ \rho_2 = 1.03 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.69 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 113.16 \\ E_1 = -0.249 \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 52.39 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 630.0 \\ E_1 = 2.30 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 = 9.43 \\ \rho_2 = 1.09 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.73 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 114.58 \\ E_1 = -0.241 \end{array} \right.$	
	$\chi_2 = 32.78 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 498.35 \\ E_1 = 8.27 \times 10^{-3} \end{array} \right.$	
$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 = 4.50 \\ \rho_2 = 12.54 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 4.31 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 180.78 \\ E_1 = -8.92 \times 10^{-2} \end{array} \right.$	
	$\chi_2 = 15.69 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 344.78 \\ E_1 = -0.247 \end{array} \right.$	
	$\chi_3 = 52.39 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 630.0 \\ E_1 = 2.30 \times 10^{-3} \end{array} \right.$	

Tabla D.20a. Modos localizados con el ajuste de los puntos  $\omega_{TO_r}$  y  $\omega_{TO_l}$  para el  $^{12}\text{C}$ .

$\rho = 11.78$	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 2.73 \\ \rho_2 = 0.95 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.59 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 109.86 \\ E_1 = -0.273 \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 9.99 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 275.11 \\ E_1 = -6.51 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 71.01 \\ \rho_2 = 0.98 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.63 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 111.15 \\ E_1 = -0.256 \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 220.06 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 1291.14 \\ E_1 = 9.51 \times 10^{-5} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 15.52 \\ \rho_2 = 1.03 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.65 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 112.12 \\ E_1 = -0.249 \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 49.55 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 612.69 \\ E_1 = 2.64 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 9.43 \\ \rho_2 = 1.09 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.70 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 113.56 \\ E_1 = -0.247 \end{array} \right.$	
	$\chi_2 = 30.99 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 484.53 \\ E_1 = 9.87 \times 10^{-3} \end{array} \right.$	
$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 4.50 \\ \rho_2 = 12.54 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 4.30 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 180.59 \\ E_1 = -8.94 \times 10^{-2} \end{array} \right.$	
	$\chi_2 = 15.40 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 341.58 \\ E_1 = -0.198 \end{array} \right.$	
	$\chi_3 = 49.75 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 613.89 \\ E_1 = 2.62 \times 10^{-3} \end{array} \right.$	

Tabla D.20b. Corrimiento isotópico de los modos localizados con el ajuste de los puntos  $\omega_{TO_r}$  y  $\omega_{TO_l}$  para el  $^{13}\text{C}$ .

$\rho = 19.11$	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 15.22 \\ \rho_2 = 1.05 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.72 \Rightarrow$	$\left\langle \begin{array}{l} \omega = 91.19 \\ E_1 = -0.238 \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 51.48 \Rightarrow$	$\left\langle \begin{array}{l} \omega = 498.0 \\ E_1 = 5.47 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
		$\chi_1 = 6.17 \Rightarrow$	$\left\langle \begin{array}{l} \omega = 172.42 \\ E_1 = -5.90 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 6.73 \\ \rho_2 = 19.84 \end{array} \right.$	$\chi_2 = 24.78 \Rightarrow$	$\left\langle \begin{array}{l} \omega = 345.50 \\ E_1 = -0.140 \end{array} \right.$
		$\chi_3 = 82.39 \Rightarrow$	$\left\langle \begin{array}{l} \omega = 630.0 \\ E_1 = 1.51 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 4.57 \\ \rho_2 = 0.97 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 16.62 \Rightarrow$	$\left\langle \begin{array}{l} \omega = 283.0 \\ E_1 = -4.18 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 120.38 \\ \rho_2 = 0.98 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.68 \Rightarrow$	$\left\langle \begin{array}{l} \omega = 89.98 \\ E_1 = -0.248 \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 392.93 \Rightarrow$	$\left\langle \begin{array}{l} \omega = 1375.78 \\ E_1 = 4.79 \times 10^{-5} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 24.77 \\ \rho_2 = 1.02 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.70 \Rightarrow$	$\left\langle \begin{array}{l} \omega = 90.49 \\ E_1 = -0.244 \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 82.39 \Rightarrow$	$\left\langle \begin{array}{l} \omega = 630.0 \\ E_1 = 1.51 \times 10^{-3} \end{array} \right.$

Tabla D.21a. Modos localizados con el ajuste de los puntos  $\omega_{TO_r}$  y  $\omega_{TA_L}$  para el  $^{12}\text{C}$ .

$\rho = 19.1 \text{ K}$	$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 = 15.22 \\ \rho_2 = 1.05 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.69 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 90.36 \\ E_1 = -0.245 \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 48.69 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 484.32 \\ E_1 = 6.53 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
	$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 = 6.73 \\ \rho_2 = 19.84 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 6.16 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 172.28 \\ E_1 = -5.91 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 24.27 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 341.98 \\ E_1 = -0.114 \end{array} \right.$
		$\chi_3 = 78.30 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 614.15 \\ E_1 = 1.71 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
	$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 = 4.57 \\ \rho_2 = 0.97 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 15.71 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 275.11 \\ E_1 = -4.07 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 = 120.38 \\ \rho_2 = 0.98 \end{array} \right.$		$\chi_1 = 1.64 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 89.13 \\ E_1 = -0.256 \end{array} \right.$
	$\chi_2 = 371.90 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 1338.47 \\ E_1 = 5.37 \times 10^{-3} \end{array} \right.$	
$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 = 24.77 \\ \rho_2 = 1.02 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.66 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 89.65 \\ E_1 = -0.251 \end{array} \right.$	
	$\chi_2 = 77.95 \Rightarrow$	$\left\{ \begin{array}{l} \omega = 612.98 \\ E_1 = 1.73 \times 10^{-3} \end{array} \right.$	

Tabla D.21b. Corrimiento isotópico de los modos localizados con el ajuste de los puntos  $\omega_{\text{TO}_r}$  y  $\omega_{\text{TA}_L}$  para el  $^{13}\text{C}$ .

$\rho = 18.67$	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 14.96 \\ \rho_2 = 1.05 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.72 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 91.17 \\ E_1 = -0.239 \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 50.63 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 493.96 \\ E_1 = 5.50 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 6.67 \\ \rho_2 = 19.92 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 6.12 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 171.80 \\ E_1 = -5.97 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 24.32 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 342.33 \\ E_1 = -0.149 \end{array} \right.$
		$\chi_3 = 82.36 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 630.0 \\ E_1 = 1.46 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
	$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 96.08 \\ \rho_2 = 0.98 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.68 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 89.98 \\ E_1 = -0.248 \end{array} \right.$
	$\chi_2 = 313.98 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 1230.01 \\ E_1 = 7.45 \times 10^{-5} \end{array} \right.$	
$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 4.57 \\ \rho_2 = 0.97 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.64 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 89.15 \\ E_1 = -0.256 \end{array} \right.$	
	$\chi_2 = 16.62 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 283.0 \\ E_1 = -4.34 \times 10^{-2} \end{array} \right.$	
$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 24.76 \\ \rho_2 = 1.02 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.69 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 90.45 \\ E_1 = -0.244 \end{array} \right.$	
	$\chi_2 = 82.36 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 630.0 \\ E_1 = 1.46 \times 10^{-3} \end{array} \right.$	

Tabla D.22a. Modos localizados con el ajuste de los puntos  $\omega_{TO_L}$  y  $\omega_{TA_L}$  para el  $^{12}\text{C}$ .

$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 14.96 \\ \rho_2 = 1.05 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.69 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 90.34 \\ E_1 = -0.245 \end{array} \right.$
	$\chi_2 = 47.89 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 480.38 \\ E_1 = 6.55 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 6.67 \\ \rho_2 = 19.92 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 6.11 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 171.66 \\ E_1 = -5.98 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
	$\chi_2 = 23.83 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 338.89 \\ E_1 = -0.121 \end{array} \right.$
	$\chi_3 = 78.25 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 614.07 \\ E_1 = 1.66 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
$\rho = 18.67 \left\{ \begin{array}{l} \rho_1 = 96.08 \\ \rho_2 = 0.98 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.64 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 89.13 \\ E_1 = -0.256 \end{array} \right.$
	$\chi_2 = 297.17 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 1196.64 \\ E_1 = 8.36 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 4.57 \\ \rho_2 = 0.97 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.62 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 88.40 \\ E_1 = -0.263 \end{array} \right.$
	$\chi_2 = 15.70 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 275.12 \\ E_1 = -4.20 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
$\left[ \begin{array}{l} \rho_1 = 24.76 \\ \rho_2 = 1.02 \end{array} \right.$	$\chi_1 = 1.66 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 89.61 \\ E_1 = -0.252 \end{array} \right.$
	$\chi_2 = 77.93 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 612.78 \\ E_1 = 1.68 \times 10^{-3} \end{array} \right.$

Tabla D.22b. Corrimiento isotópico de los modos localizados con el ajuste de los puntos  $\omega_{TO_L}$  y  $\omega_{TA_L}$  para el  $^{13}\text{C}$ .

$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 = 0.1 \\ \rho_2 = 16 \end{array} \right.$	$\left[ \rho = 11.78 \right.$	$\chi_1 = 1.42 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 103.98 \\ E_1 = 0.518 \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 11.56 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 296.02 \\ E_1 = 7.37 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
		$\chi_3 = 56.75 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 655.68 \\ E_1 = 1.39 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 = 0.1 \\ \rho_2 = 22 \end{array} \right.$	$\left[ \rho = 18.67 \right.$	$\chi_1 = 1.42 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 82.94 \\ E_1 = 0.560 \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 17.94 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 294.02 \\ E_1 = -4.73 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
		$\chi_3 = 79.24 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 617.92 \\ E_1 = 8.897 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 = 0.1 \\ \rho_2 = 22 \end{array} \right.$	$\left[ \rho = 19.11 \right.$	$\chi_1 = 1.42 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 82.92 \\ E_1 = 0.561 \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 18.30 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 296.93 \\ E_1 = 4.62 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
		$\chi_3 = 79.47 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 618.73 \\ E_1 = 8.72 \times 10^{-3} \end{array} \right.$

Tabla D.23a. Modos localizados con la variación de la "ρ<sub>1</sub>" y "ρ<sub>2</sub>" con cada "ρ" para el <sup>12</sup>C.

$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 = 0.1 \\ \rho_2 = 16 \end{array} \right\}$	$\left[ \rho = 11.78 \right]$	$\chi_1 = 1.42 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 103.98 \\ E_1 = 0.518 \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 11.26 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 292.14 \\ E_1 = -7.04 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
		$\chi_3 = 54.26 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 641.14 \\ E_1 = 2.11 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 = 0.1 \\ \rho_2 = 22 \end{array} \right\}$	$\left[ \rho = 18.67 \right]$	$\chi_1 = 1.42 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 82.94 \\ E_1 = 0.560 \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 17.43 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 289.87 \\ E_1 = -4.51 \times 10^{-2} \end{array} \right.$
		$\chi_3 = 75.91 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 604.80 \\ E_1 = 1.79 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 = 0.1 \\ \rho_2 = 22 \end{array} \right\}$	$\left[ \rho = 19.11 \right]$	$\chi_1 = 1.42 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 82.92 \\ E_1 = 0.561 \end{array} \right.$
		$\chi_2 = 17.78 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 292.70 \\ E_1 = -4.40 \times 10^{-3} \end{array} \right.$
		$\chi_3 = 76.16 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \omega = 605.70 \\ E_1 = 1.84 \times 10^{-3} \end{array} \right.$

Tabla D.23b. Corrimiento isotópico de los modos localizados con la variación de la " $\rho_1$ " y " $\rho_2$ " con cada " $\rho$ " para el  $^{13}\text{C}$ .



## ***Referencias***

---

- Allen, J. W., *J. Phys.*, **C3**, L48 (1969).
- Andrade, L. y M. Sánchez, *Supl. Bol. Mex. Fis.*, **9-3**, 73 (1995).
- Andrade, L., 1977<sup>b</sup>, Curso de Doctorado. Temas selectos de física matemática (Estados de superficies por orbitales moleculares) Facultad de Ciencias, UNAM (no publicado).
- Andrade, L., 1978, Notas del Curso de Doctorado. Seminario de Investigación. Análisis de los estados de impurezas, superficie e interface a través de la matriz S y la función de Green. Facultad de Ciencias, UNAM (no publicado); Curso de Doctorado. Temas selectos de física del estado sólido (Estados de superficies por orbitales moleculares) Facultad de Ciencias, UNAM (no publicado).
- Andrade, L., 1987, Reporte interno. Facultad de Ciencias, UNAM (no publicado).
- Andrade, L., *J. Phys. (Condens. Matter)*, **1**, 2163 (1989); Andrade, L., 1981, *Recent Progress in Many-Body Theory*, vol. 142 (Berlin:Springer) p 309; Andrade, L., 1977<sup>a</sup>, Proc. 5<sup>th</sup> Latinamerican Symp. Solid State Physics (Lima:UNI) p 7.
- Andrade, L., Miranda G. y E. Herrera G., *Supl. Bol. Mex. Fis.*, **9-3**, 86 (1995).
- Andrade, L., y Cruz Irisson M., *Bol. Soc. Mex. Fis.*, **2**, 12 (1988).
- Barker, A. S. Jr. and Sievers A. J., *Rev. Mod. Phys.*, **47**, Suppl. 2 Fall (1975).

- Barker, A. S. Jr., *Phys. Rev.*, **165**, 917 (1968).
- Born, M. and K. Huang, 1954: *Dynamical Theory of Classical Lattices*, (Oxford University Press, New York).
- Boutin, Henri and Sidney Yip, 1968: *Molecular Spectroscopy with Neutrons*, (The M. I. T. Press), 226 pp.
- Clark, George L., 1960: *The Encyclopedia of Spectroscopy*, (Reinhold Publishing Corporation), 787 pp.
- Cohen, M., V. Heine and J. C. Phillips, *Scientific American*, **66**, June 1982.
- Cohen, C., D. Bernard, F. Laloč, 1977: *Quantum Mechanics*, (Jhon Wiley & Sons), Vol. I, p 586.
- Cruz Irisson M., 1990, Tesis Profesional, FCUNAM (1990).
- Davidson, B. R., R. C. Newman, D. A. Robbie, M. J. L. Sangster, J. Wagner, A. Fischer and K. Ploog, *Semicond. Sci. Technol.*, **8**, 611 (1993).
- de Llano, Manuel, 1996: *Mecánica Cuántica*, (Facultad de Ciencias, UNAM), 243 pp.
- Dean, P. J. And C. H. Henry, *Phys. Rev.*, **176**, 928 (1968).
- Dean, P. J., *Phys. Rev.*, **157**, 655 (1967).
- Dekker, Adrianus J., 1981: *Solid State Physics*, (The Macmillan L. T. D.), 540 pp.
- Dolling, G. and R. A. Cowley, *Proc. Phys. Soc.*, **88**, 463 (1966).
- Elliot, R. J., Krumhansl J. A. and P. L. Leath, *Rev. Mod. Phys.*, **46**, 465 (1974).
- Gaur S. P., Vetelino J. F. and Mitra S. S., *J. Phys. Chem. Solids*, **32**, 2737 (1971).
- Giannozzi, Paolo, Stefano de Gironcoli, Pasquale Pavone and Stefano Baroni, *Phys. Rev. B*, **43**, 7231 (1991).
- Grimm, A., *Solid State Commun.*, **10**, 1305 (1972).
- Hayes W., Mac Donald H. F. and Sennet C. T., *J. Phys. C (Solid State Phys.)*, **2**, 2402 (1969).

- Herrera E., Sánchez M. Y Andrade L., *Supl. Bol. Soc. Mex. Fís.*, **11-3**, 87 (1987).
- Herzberg, Gerhard, 1945: *Molecular Spectra and Molecular Structure*, (Lancaster Press), 632 pp.
- Hobden M. V. and Russell J. P., *Phys. Lett.*, **13**, 39 (1964).
- Jain K. P. and Prabhakaran. *Phys. Rev.* **88**, 1503 (1973).
- Kittel, Charles, 1971: *Introduction to Solid State Physics*, (Jhon Wiley & Sons), 766 pp.
- Kleinman, D. A. and W. G. Spitzer, *Phys. Rev.*, **118**, 110 (1960).
- Landau, L. D. y E. M. Lifshitz, 1983: *Mecánica Cuántica No Relativista*, Vol. 3, (Reverté), 714 pp.
- Monemar B., *Phys. Rev B*, **8**, 5711 (1973).
- Patterson, J. D., 1971: *Introduction to the Theory of Solid State Physics*, (Addison - Wesley), 388 pp.
- Robbie D.A., M.J.L. Sangster and P. Pavone., *Phys. Rev B*, **51**, 10489 (1995).
- Russel, J. P., *J. Phys. (Paris)*, **26**, 629 (1965).
- Sakurai, J. J., 1996: *Modern Quantum Mechanics*, (Addison-Wesley), 500 pp.
- Schaefer, G., *J. Phys. Chem. Solids*, **12**, 233 (1960).
- Shue-Chu Shen, *Progress in Phys.*, **4**, 452 (1984).
- Singh R. S. and Mitra S. S., *Phys. Rev.*, **B5**, 733 (1972).
- Spitzer W.G., Allred W., Blum S. E. and Chicotka R. J., *J. Appl. Phys.*, **40**, 2589 (1969).
- Talwar D. N. and Agrawal B. K., *Phys. Rev.*, **B12**, 1432 (1975).
- Talwar D. N. and Agrawal B. K., *Phys. Rev.*, **B9**, 2539 (1974).
- Taylor, Philip L., 1970: *A Quantum Approach to the Solid State*, (Prentice-Hall), 322 pp.
- Thompson F., and R. C. Newman, *J. Phys. C (Solid State Phys.)*, **4**, 3249

(1971).

- Vandevyver M. et Plumelle P., *J. Phys. Chem. Solids*, **38**, 765 (1977).
- Vandevyver M. et Plumelle P., *Phys. Rev.*, **B17**, 675 (1978).
- Wagner J., A. Fischer and K. Ploog, *Appl. Phys. Lett.*, **62**, 3482 (1993).
- Yarnell, J. L., J. L. Warren, R. G. Wenzel and P. J. Dean, 1968, *Neutron Inelastic Scattering*, Volume I, (Vienna: International Atomic Energy Agency), p. 301.