



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA
DE MEXICO
FACULTAD DE CIENCIAS

VIBRACIONES EN REDES
DE UNA Y DOS DIMENSIONES

T E S I S

Que para obtener el Título de:

FISICO

Presenta:

JORGE IGNACIO BENITEZ PUEBLA



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

VIBRACIONES EN REDES DE UNA Y DOS DIMENSIONES

JORGE IGNACIO BENITEZ PUEBLA

ASESOR: DR. RAFAEL A. BARRIO PAREDES

INDICE

Introducción	1
CAPITULO I.	
1.1 El movimiento vibratorio en arreglos periódicos.	6
1.2 Formulación general del movimiento oscilatorio de baja amplitud.	13
1.3 Ejemplos sencillos.	20
CAPITULO II. La Cadena Lineal Ordenada (Fuerzas Centrales).	
2.1 La Cadena Finita.	32
2.1.1 Con extremos fijos.	33
2.1.2 Extremos libres.	39
2.1.3 Cíclica.	45
2.1.4 Métodos de la matriz de transferencia para la cadena cíclica.	55
2.2 La Cadena Infinita.	
2.2.1 Análisis de la Cadena Lineal Ordenada Infinita a través de las funciones de Green.	62
2.2.2 Cálculo de la densidad de estados.	71
2.2.3 Zona de Brillouin, Curva de Dispersión, Frecuencia Máxima.	75
CAPITULO III. La Red Cuadrada	
3.1 Ecuación de Movimiento. Relación de Dispersión, Zona de Brillouin, Curva de Dispersión, Frecuencia de Corte.	79
3.2 Cálculo de la densidad de estados para la Red Cuadrada.	91

CAPITULO IV. La Red Rectangular.	96
4.1 Presentación del modelo	97
4.2 Renormalización de la masa y la constante de fuerza para la red rectangular.	103
4.3 Cálculo de la relación de dispersión y densidad de estados.	112
4.4 Análisis de resultados	119
Conclusiones.	128
APENDICES.	
A1. Derivación de la ecuación general de movimiento en términos de la función de Green para vibraciones en una red.	132
A2. Derivación de $G(\vec{k})$ para la red bidimensional y cálculo de la relación de dispersión para la red cuadrada.	138
A3. Extrapolación al infinito del número n de masas intermedias en los elementos horizontales de la red rectangular.	145
A4. Listado del programa que calcula la densidad de estados para redes rectangulares.	149
Referencias.	

INTRODUCCION

El conocimiento de la materia y de sus leyes ha cautivado al hombre desde tiempos inmemorables. El descubrimiento de esos pequeños componentes de la materia, los átomos, y de los movimientos de estos dentro de ella, nos ha suministrado valiosa información sobre las propiedades y estructura de la misma.

En términos generales, la materia se observa en tres diferentes estados: sólido, líquido y gaseoso. En los últimos años se han hecho notables avances en el estudio del estado sólido, ahora se comprenden con mayor claridad las propiedades mecánicas, termodinámicas y electrónicas de estos materiales. En particular, el deseo de "escuchar" las vibraciones de los átomos, dentro de la materia sólida e imaginar las formas en que los átomos se mueven nos ha conducido a estudiar sus modos normales de vibración, concepto primordial en el entendimiento de estas propiedades.

Se pueden distinguir en general dos tipos de sistemas en los materiales sólidos, los sistemas ordenados y los sistemas desordenados. Un sistema ordenado, es aquel que se compone de arreglos idénticos de átomos que se repiten periódicamente; estos materiales suelen llamarse cristales. Un sistema desordenado se puede entender como aquellos sistemas que aunque no presentan un orden a largo alcance y por lo tanto no poseen simetría translacional, muestran un orden a corto alcance que se puede aprovechar para su estudio. Los sistemas desordenados se clasifican en dos grupos: sistemas de desorden sustitucional y sistemas de desorden topológico,

en los primeros tenemos a las aleaciones y al segundo grupo pertenecen los materiales amorfos. En cualquiera de todos estos casos para estudiar las vibraciones, se cuenta con un modelo que sobresale por su sencillez y consiste fundamentalmente, en suponer pequeñas masas unidas por muelles que sustentuyen a los átomos y a las fuerzas de cohesión entre ellas. Las fuerzas de cohesión, se pueden tomar como fuerzas elásticas es decir, proporcionales a los desplazamientos, y por lo tanto podemos aplicar la conocida Ley de Hooke. Otra importante aproximación que se hace, es considerar sólo interacciones a los vecinos más próximos.

Este modelo teórico puede ser desarrollado en una, dos y tres dimensiones. Hacer estudios de sistema teórico de dimensionalidad restringida no es solo un ejercicio que pueda resultar matemáticamente menos complejo, sino que existen sistemas físicos de tres dimensiones que presentan características parecidas a sistemas teóricos de una y dos dimensiones; ejemplos de esos son los polímeros y los compuestos orgánicos en cadenas y capas respectivamente. Sin embargo, existen diferencias entre los sistemas reales y los teóricos, citaremos concretamente el caso de los polímeros, que idealmente se pueden tratar como sistemas unidimensionales, pero cuyo espectro fonónicos es algo intermedio entre el obtenido teóricamente para una y dos dimensiones. Se piensa que esto se debe a que las cadenas poliméricas, se unen de vez en cuando. Es así como se tiene un problema de un sistema con dimensionalidad no entera: entre una y dos dimensiones.

En la primera parte de esta tesis hemos analizado cadenas lineales unidimensionales y la red cuadrada. En la segunda parte nos ocupamos de la red rectangular, que constituye un primer paso en el desarrollo de un modelo general, donde al introducir desorden, se pueda estudiar dimensionalidad no entera.

Esta red esencialmente consiste en un arreglo de N cadenas lineales de partículas de igual masa unidas por resortes, que producen fuerzas centrales armónicas de magnitud constante, es decir, cada N sitios se tiene una ligadura entre las cadenas. El desarrollo posterior de este modelo, tema de otro trabajo, debe contemplar el caso desordenado, esto es, dichas cadenas estarían unidas al azar, con tal que en promedio exista una ligadura cada N sitios. Los espectros fonónicos así obtenidos, ya serían comparados con los datos experimentales de los espectros reales de los polímeros mencionados.

En vista de esta problemática, hemos organizado el material, en la siguiente forma:

En el primer capítulo, abordamos el problema en general. Se revisa la teoría lagrangiana de las pequeñas oscilaciones. Se discute la ecuación de movimiento, la matriz dinámica, la ecuación de autovectores y autovalores, elementos todos relacionados con esta teoría. Se definen y se explican en forma breve, los conceptos fundamentales del movimiento oscilatorio en arreglos periódicos, tales como: frecuencias normales de vibración, modos normales de vibración, frecuencia de corte, espacio recíproco, zona de Brillouin, curvas de dispersión y densidad de estados. Resolvemos ejemplos sencillos para aclarar las ideas anteriores y además familiarizarnos con las técnicas matemáticas que más tarde se aplican a casos más complejos.

En la primera parte del capítulo dos, se estudia la cadena lineal finita con diferentes condiciones a la frontera: extremos fijos, extremos libres y cíclica. Aquí hemos introducido un método original que permite resolver en forma inmediata el determinante secular, empleando los polinomios de Tchevyshev de I y II tipo. En el caso de la cadena cíclica

aplicamos el método de la matriz de transferencia en el análisis, que resulta muy ventajoso y eficaz. En los tres casos aprovechamos la periodicidad de la cadena lineal para encontrar las frecuencias y los modos normales de vibración. Estos resultados los conjuntamos dentro de la relación de dispersión y los discutimos ampliamente.

En la segunda parte de este capítulo examinamos la cadena lineal ordenada infinita. La periodicidad que también presenta este sistema, nos permite aplicar el teorema de Bloch a la ecuación de movimiento y trasladarnos al espacio k , donde podemos interpretar nuestros resultados en la primera zona de Brillouin y es muy cómodo visualizar el comportamiento de este sistema. Entre los resultados que se deben mostrar, ésta es la existencia de una frecuencia máxima que alcanza el sistema, además, ésta la calculamos analíticamente, (frecuencia de corte), la relación de dispersión que relaciona las frecuencias normales de vibración con los modos normales, la obtenemos mediante la matriz de transferencia. Para calcular la densidad de estados hemos usado el método de las funciones de Green, no sin antes definir las en el apéndice uno. Encontramos una relación para la densidad de estados en términos de estas funciones y el cálculo resulta inmediato.

En el capítulo tres se realizó un estudio análogo de las vibraciones, sólo que ahora en una estructura de dos dimensiones: la red cuadrada. Aprovechamos nuevamente la periodicidad de la red para encontrar la relación de dispersión, mostramos la primera zona de Brillouin, trazamos la curva de dispersión y las superficies isoenergéticas, calculamos y comentamos la frecuencia de corte para este caso. Aplicamos también las funciones de Green para encontrar la densidad de estados. Para esto se derivó la expresión de la función

de Green para la red cuadrada en el apéndice dos, donde además confirmamos la forma de la expresión para la relación de dispersion, que por este método se obtiene en forma directa. A través de un cálculo numérico evaluamos la densidad de estados. Por último, se traza la curva de la densidad, que representa el espectro fonónico.

En el cuarto y último capítulo de esta tesis nos ocupamos de la red rectangular, que como ya se dijo, constituye el primer paso al estudio de espectros fonónicos de sistemas desordenados reales. El estudio de la red rectangular comprende conocer, la ecuación de movimiento, la relación de dispersión y la densidad de estados. La expresión de la densidad de estados en términos de las funciones de Green obtenida para la red cuadrada se modifica adecuadamente para calcularla en este caso. Elaboramos un programa computacional que aparece en el apéndice cuatro, donde se calcula numéricamente la densidad de estados para varios casos de redes rectangulares. Finalmente incluimos un análisis de estos espectros, discutimos los principales resultados y destacamos los casos extremos, es decir, extrapolamos cuando n tiene a uno y, en el apéndice tres, lo hacemos cuando n tiende a infinito. En esta forma podremos comprobar que nuestro modelo alcanza los límites correctos. Además en las conclusiones se presenta una revisión crítica de todo el trabajo.

CAPITULO I.

1.1 El movimiento vibratorio en arreglos periódicos.

1.2 Formulación general del movimiento oscilatorio de baja amplitud.

1.3 Ejemplos sencillos.

1.1 EL MOVIMIENTO VIBRATORIO EN ARREGLOS PERIODICOS

Periodicidad- Frecuencias normales- Modos normales de vibración- Relación de dispersión- Curvas de dispersión Frecuencia de corte- Densidad de estados.

Impulsado por el deseo indómito por conocer a la naturaleza y a sus leyes, y describirlas a través de formas simétricas, un descubrimiento de grandes alcances ha hecho el hombre: la periodicidad.

Se encontró que la estructura interna de algunos materiales sólidos está constituida por agrupaciones idénticas de átomos o de moléculas, que se repiten periódicamente formando redes ordenadas. Estas estructuras no permanecen en reposo sino que vibran continuamente.

No menos importante resultó el hecho de que las funciones que se pueden definir en la red, tales como los movimientos de los elementos que la forman, las frecuencias a las que vibra, etc... son también periódicas ¡y con el mismo período de la red! Este hecho tan notable constituye lo que se conoce como Teorema de Bloch.¹

Un modelo muy común para estudiar las vibraciones en estas redes ordenadas, es un arreglo de masas y resortes ideales acoplados, formando un sistema de osciladores armónicos. Estas masas sustituyen a los átomos, y los resortes representan las fuerzas de cohesión entre ellos. Cuando se ponen a vibrar a baja amplitud uno de estos arreglos, las amplitudes y las fases del movimiento dependen de nuestras condiciones iniciales; es decir de la manera y de la posición con que se inicia el movimiento. Sin embargo se puede lograr

que las masas que constituyen el arreglo vibren todas a una misma frecuencia. Esas frecuencias que llamamos frecuencias propias o frecuencias normales de vibración, no dependen de las condiciones iniciales del movimiento, sino que de las propiedades del sistema. Además, no toman cualquier valor, sino valores discretos.

Comprobaremos este último hecho en la cadena lineal finita ordenada, con diferentes condiciones de frontera, en la red cuadrada y en la red rectangular.

A las formas particulares que adquieren las cadenas y redes vibrando a estas frecuencias normales, se les conoce como modos normales de vibración o autoestados.

Podemos visualizar fácilmente este fenómeno en una dimensión. Tomamos por ejemplo el caso de cuerda vibrante sujeta en sus extremos. En un modo normal todos los puntos de la cuerda están vibrando a una sola frecuencia, en forma senoidal, aunque con amplitudes diferentes. Lo que sucede, es que si perturbamos un extremo a esta cuerda confinada, se inicia una oscilación en forma de una onda viajera que se refleja en el otro extremo. Esta onda reflejada se combina con alguna otra incidente produciéndose una onda estacionaria. Así, la condición para que se establezca una onda estacionaria, es que sus extremos finales sean nodos y todos los demás puntos de la cuerda vibren a una misma frecuencia. Entonces, la longitud l de la cuerda debe medir exactamente un número entero de veces media longitud de onda λ ; es decir:

$$(1.1) \quad \frac{n\lambda}{2} = \ell \quad \text{para } n=1,2,3, \dots$$

Si conocemos la velocidad v de la onda, y puesto que:

$$(1.2) \quad \lambda = \frac{v}{f} ,$$

las frecuencias normales de vibración f_n son:

$$(1.3) \quad f_n = \frac{nv}{2\ell} \quad \text{para } n=1,2,3, \dots$$

que efectivamente toman valores discretos.

Es importante señalar que sólo en este caso las frecuencias son múltiplos de las otras. En general esto no se presenta en cualquier otro sistema.

La razón de este comportamiento tan peculiar es que en la cuerda fija, la densidad y la tensión son uniformes. Por lo tanto todos los puntos de la cuerda tienen inercia y elasticidad igualmente distribuida; de tal forma que existen muchas maneras posibles de intercambiar energía potencial con energía cinética, durante la oscilación. En cambio en un sistema masa-resorte, la elasticidad está concentrada en el resorte y la inercia en la masa, así que sólo hay una manera de intercambiar energía potencial en energía cinética o viceversa.

El primer modo normal de vibración para la cuerda vibrante confinada corresponde al caso sin nodos intermedios, al segundo modo corresponde un nodo intermedio, al tercer modo dos nodos intermedios. En la fig. 1.1 mostramos estos

2.1.1 LA CADENA LINEAL FINITA CON EXTREMOS FIJOS

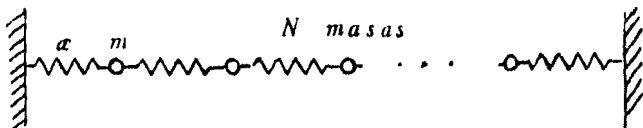


Fig. 2.2 Cadena lineal ordenada finita con extremos libres.

Contamos ahora con los elementos necesarios para examinar la cadena lineal ordenada.⁴

Este es un arreglo formado de N masas iguales conectadas por resortes de igual constante de fuerzas α , acotado por paredes fijas en los extremos, tal como se muestra en la Fig. 2.1. Consideremos al sistema vibrando y tomemos sólo interacciones a primeros vecinos. Este es el caso conocido como de "fuerzas centrales".

En vista de que los extremos están fijos, la condición a la frontera queda expresada por;

$$(2.1) \quad u_0 = u_{N+1} = 0,$$

donde u_0 y u_{N+1} son los desplazamientos de masas ficticias 0 y $N+1$ respectivamente.

La energía potencial para la cadena es:

$$(2.2) \quad V = \alpha/2 \left[u_1^2 + \sum_2 (u_i - u_{i-1})^2 + u_N^2 \right],$$

donde aquí el subíndice etiqueta el sitio.

Los coeficientes de la matriz dinámica son:

tres primeros modos normales.

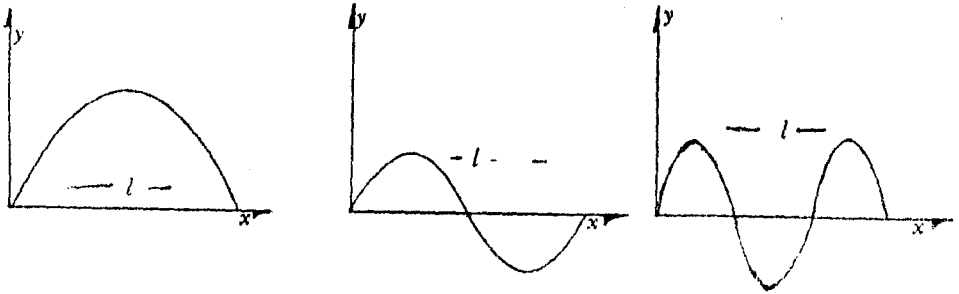


Fig. 1.1 Tres primeros modos normales de una cuerda vibrante confinada.

Podemos generalizar este resultado diciendo que el número de modos normales es igual al número de nodos menos uno.

En dos dimensiones vamos a tener también nodos, pero esta vez serán líneas (líneas nodales), y para tres dimensiones tendremos superficies nodales.

Por otro lado, el número de modos normales de vibración, es igual al número de grados de libertad menos el número de constricciones que tiene el sistema. Comprobaremos este importante resultado para los casos ya mencionados. Así para la cadena lineal ordenada de N masas con la construcción de moverse en una dirección, hay N modos normales de vibración.

En un sistema infinito el número de modos es infinito, aunque acotado.

La expresión matemática para los modos normales de vibración se encuentra aprovechando la periodicidad de la red

y así aplicar el Teorema de Bloch.

Es decir; de las ecuaciones de movimiento para las masas, conjuntamente con nuestras condiciones de frontera; se contraremos una sola expresión para todo el conjunto, que nos relaciona la frecuencia normal con que vibra el arreglo y el modo respectivo ($\omega = \omega(\vec{k})$ o también $\omega^2 = \omega^2(\vec{k})$, donde \vec{k} es el vector de onda de la vibración y ω la frecuencia normal). Estas relaciones reciben el nombre de relaciones de dispersión. Las gráficas que resultan de éstas se conocen como curvas de dispersión.

El caracter periódico que también van a presentar estas gráficas, nos permite trabajar en una región representativa en otro espacio (el espacio \vec{k}); donde resulta muy cómodo y exacto estudiar las propiedades de la red, como lo constataremos para los problemas particulares que nos hemos propuesto. Estas regiones las conocemos como Zonas de Brillouin.

Una característica relevante de estas vibraciones en redes periódicas, es la existencia de una frecuencia máxima o frecuencia de corte. Es decir, existe una frecuencia máxima para la cual podemos excitar nuestro sistema, y tener a un modo normal. Más allá de este límite el movimiento no se propaga, sino que se desvanece en la red.

Podemos observar esta frecuencia máxima en las curvas de dispersión o calcularla a través de nuestras relaciones de dispersión.

Para conocer la distribución de los modos normales de vibración a determinadas frecuencias es necesario calcular

la densidad de estados; que se define como el número de modos normales por intervalo unidad de frecuencia. Este concepto resulta muy útil en vista que podemos calcular promedios de cualquier variable estadística, tal es como la energía total del sistema o su calor específico.

Así hemos definido los conceptos básicos que se manejan a lo largo de esta tesis; asimismo hemos comentado brevemente algunos resultados que obtendremos más adelante para nuestros problemas particulares, donde se discuten ampliamente. Empero creemos necesario presentar enseguida una formulación al problema de oscilaciones de baja amplitud en forma general, desde el punto de vista clásico.

1.2 FORMULACION GENERAL DEL MOVIMIENTO OSCILATORIO DE BAJA AMPLITUD.

Pensemos en un conjunto de masas y resortes acoplados que forman una red, oscilando a baja amplitud, alrededor de sus posiciones de equilibrio estable.

Las características principales que suponemos tiene tal sistema vibrante de baja amplitud son:

a) Tratamos con un sistema cerrado, porque suponemos que no está sometido a fuerzas externas.

b) Es un sistema conservativo, ya que hemos despreciado fuerzas disipativas o de fricción; en consecuencia, la energía potencial sólo depende de la posición, y la lagrangiana no depende del tiempo explícitamente.

Vamos a representar q_1, \dots, q_n a las coordenadas generalizadas. Las fuerzas generalizadas Q_i satisfacen, en las posiciones de equilibrio,

$$(1.4) \quad Q_i = -\left(\frac{\partial V}{\partial q_i}\right) = 0.$$

Esto significa que el potencial que hemos llamado V tiene un extremal en las posiciones de equilibrio.

Si las pequeñas desviaciones se denotan por q_i y las coordenadas generalizadas en equilibrio por, q_{01}, \dots, q_{0i} ;

$$(1.5) \quad \Delta q_i = q_{0i} + \dot{q}_i \quad .$$

Por simplicidad, tomemos las coordenadas cartesianas en una dimensión, u_1, \dots, u_n como las coordenadas generalizadas, por lo cual las ecuaciones (1.4) y (1.5) nos quedan:

$$(1.6) \quad \Delta u = u_{0i} - u_i,$$

$$(1.7) \quad F_i = -\frac{\partial V}{\partial u_i} = 0.$$

En vista de que V es analítica, entonces podemos usar el Teorema de Taylor² y expandir la energía potencial alrededor de las posiciones de equilibrio u_{0i} ; por lo tanto, tenemos para un sistema de n partículas.

$$(1.8) \quad V(u_1, \dots, u_n) = V(u_{01}, \dots, u_{0n}) + \\ + \sum_{u_i=1}^n \left(\frac{\partial^2 V}{\partial u_i \partial u_j} \right) (u_i - u_{0i}) (u_j - u_{0j}) + \dots +$$

Si suponemos que la posición de equilibrio, coincide con el cero de potencial de nuestro sistema de referencia; el primer término de la serie es nulo y por la condición (1.7) el segundo término es también nulo.

En consecuencia, el primer término de la serie diferente de cero, es el cuadrático en los desplazamientos ($u_i - u_{0i}$). La aproximación de oscilaciones pequeñas nos permite despreciar términos de orden mayor y escribir:

$$(1.9) \quad V = \frac{1}{2} \sum_{ij} \left(\frac{\partial^2 V}{\partial u_i \partial u_j} \right) (u_i - u_{0i}) (u_j - u_{0j}).$$

Por otro lado, ya que las coordenadas generalizadas

no dependen explícitamente del tiempo y nuevamente por simplicidad tomando a las coordenadas cartesianas en una dimensión, la energía cinética queda descrita por,

$$(1.10) \quad T = \frac{1}{2} \sum_{ij} M_{ij} (\dot{u}_i - \dot{u}_{0i}) (\dot{u}_j - \dot{u}_{0j}),$$

donde M_{ij} es el tensor de masas, que es simétrico; es decir:

$$(1.11) \quad M_{ij} = M_{ji}.$$

Sea:

$$(1.12) \quad \frac{\partial^2 V}{\partial u_i \partial u_j} = D_{ij}$$

que también es simétrico, esto es:

$$(1.13) \quad D_{ij} = D_{ji}.$$

por lo tanto, la lagrangiana toma la forma:

$$(1.14) \quad L = \frac{1}{2} \sum_{ij} (M_{ij} (\dot{u}_i - \dot{u}_{0i}) (\dot{u}_j - \dot{u}_{0j}) - D_{ij} (u_i - u_{0i}) (u_j - u_{0j})).$$

Para obtener la ecuación de movimiento recordamos la ecuación de Lagrange³.

$$(1.15) \quad \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{u}} \right) - \frac{\partial L}{\partial u} = 0.$$

La diferencial total de la lagrangiana (1.14) es:

$$\begin{aligned}
 (1.16) \quad dL = & \sum_{ij} \{ M_{ij} (\dot{u}_i - \dot{u}_{0i}) d(\dot{u}_j - \dot{u}_{0j}) + \\
 & + M_{ij} (\dot{u}_j - \dot{u}_{0j}) d(\dot{u}_i - \dot{u}_{0i}) - \\
 & - D_{ij} (u_i - u_{0i}) d(u_j - u_{0j}) - \\
 & - D_{ij} (u_j - u_{0j}) d(u_i - u_{0i}) \}.
 \end{aligned}$$

Para efectuar la suma podemos intercambiar i con j en el primero y tercer términos; usando las relaciones de simetría (1.11), (1.13) la última ecuación se reduce a:

$$\begin{aligned}
 (1.17) \quad dL = & \sum_{ij} \{ M_{ij} (\dot{u}_j - \dot{u}_{0j}) d(\dot{u}_i - \dot{u}_{0i}) - \\
 & D_{ij} (u_j - u_{0j}) d(u_i - u_{0i}) \}.
 \end{aligned}$$

Entonces:

$$(1.18) \quad \frac{\partial L}{\partial (u_i - u_{0i})} = \sum_j M_{ij} (u_j - u_{0j}),$$

$$(1.19) \quad \frac{\partial L}{\partial (u_i - u_{0i})} = - \sum_j V_{ij} (u_j - u_{0j}).$$

Finalmente, las ecuaciones de movimiento son:

$$(1.20) \quad \sum_j M_{ij} (\ddot{u}_j - \ddot{u}_{0j}) + \sum_j K_{ij} (u_j - u_{0j}) = 0.$$

Estas ecuaciones de movimiento son ecuaciones diferenciales homogéneas con coeficientes constantes, por lo tanto, proponemos una solución del tipo:

$$(1.21) \quad (u_j - u_{0j}) = a_j \exp(-i\omega t),$$

Hemos aplicado una transformada de Fourier al espacio de las ω 's, que representan las frecuencias propias o frecuencias normales de vibración, y las a 's son las amplitudes de la oscilación.

Sustituyendo la ecuación (1.21) en la (1.20) nos queda:

$$(1.22) \quad \sum_j (D_{ij} a_j - \omega^2 M_{ij} a_j) = 0.$$

Esta relación constituye un sistema de N ecuaciones lineales homogéneas, para las a_j que tienen solución diferente de la trivial, si el determinante de los coeficientes es cero.

Esto es:

$$(1.23) \quad \begin{vmatrix} D_{11} - \omega^2 M_{11} & D_{12} - \omega^2 M_{12} & \dots & D_{1n} - \omega^2 M_{1n} \\ D_{21} - \omega^2 M_{21} & D_{22} - \omega^2 M_{22} & \dots & D_{2n} - \omega^2 M_{2n} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ D_{n1} - \omega^2 M_{n1} & \dots & \dots & D_{nn} - \omega^2 M_{nn} \end{vmatrix} = 0,$$

o expresado como un problema de valores propios, no ordinario, por la presencia de \underline{M} , que es en general diferente de la identidad \underline{I} , y se tiene:

$$(1.24) \quad \underline{\underline{D}}\underline{\underline{a}} = \lambda \underline{\underline{M}}\underline{\underline{a}} , \quad \text{donde}$$

$$(1.25) \quad \lambda = \omega^2 .$$

y finalmente el determinante (1.23) se puede escribir,

$$(1.26) \quad |\underline{\underline{M}}\omega^2 \underline{\underline{I}} - \underline{\underline{D}}| = 0 ,$$

que es la llamada ecuación característica o secular y $\underline{\underline{D}}$ la llamada matriz dinámica.

Si resolvemos este sistema, nos queda una ecuación algebraica de grado N respecto a ω^2 , cuyas raíces nos dan las frecuencias normales de vibración. Si retomamos la ecuación de valores propios (1.24) y reemplazamos estas ω 's, obtenemos los vectores propios que corresponden a los modos normales de vibración.

Consideramos a continuación algunos ejemplos sencillos, con el fin de ilustrar la técnica y aplicar la teoría descrita; para abordar en el siguiente capítulo el problema de la cadena lineal.

1.3 EJEMPLOS

i) Iniciamos esta sección con el estudio de un sistema muy simple, formado por dos masas iguales acopladas a dos resortes de igual constante de fuerza α , como se muestra en la figura 1.2.

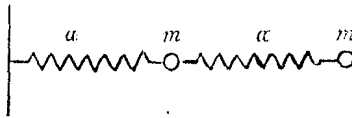


Fig. 1.2 Sistema de dos masas iguales con resortes iguales sujeto en uno de sus extremos.

Ya que tenemos sólo fuerzas centrales a primer orden, la energía potencial es, según la ecuación (1.6),

$$(1.28) \quad V = \frac{1}{2} \alpha u_1^2 + \frac{1}{2} \alpha (u_1 - u_2)^2 \quad ,$$

en donde u_1 , u_2 son los desplazamientos de las masas m_1 y m_2 respectivamente, en la dirección x .

Calculemos ahora los elementos de \underline{D} ,

$$(1.29) \quad \frac{\partial^2 V}{\partial u_1^2} = 2\alpha \quad ; \quad \frac{\partial^2 V}{\partial u_2 \partial u_1} = -\alpha \quad ;$$

$$\frac{\partial^2 V}{\partial u_2^2} = \alpha \quad ; \quad \frac{\partial^2 V}{\partial u_1 \partial u_2} = -\alpha \quad .$$

Entonces, la ecuación secular es:

$$(1.30) \quad \begin{vmatrix} M\omega^2 - D & \\ & \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \omega^2 M & 0 \\ 0 & M \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 1 \end{vmatrix} = 0$$

Deseamos encontrar tanto las frecuencias normales, como los modos normales de vibración. Aprovechamos para mostrar un método general para resolver el problema de valores propios de una matriz de 2×2 .

Consideramos una ecuación secular de la forma:

$$(1.31) \quad \begin{vmatrix} M\omega^2 - A & -C \\ -C & M\omega^2 - B \end{vmatrix} = (M\omega^2 - A) (M\omega^2 - B) - C^2 = 0;$$

En la que A, B, C, son los elementos de la matriz dinámica.

Por lo tanto, los valores propios son:

$$(1.32) \quad M\omega_1^2 = \frac{1}{2}(A+B) + F$$

$$(1.33) \quad M\omega_2^2 = \frac{1}{2}(A+B) - F ;$$

en donde F es,

$$(1.34) \quad F = \frac{1}{2} \sqrt{(A-B)^2 + 4C^2}$$

y ω_1 ω_2 representan las frecuencias de vibración.

Si definimos;

$$(1.35) \quad b_1 = A - M\omega_1^2 ,$$

$$(1.36) \quad b_2 = A - M\omega_2^2 ;$$

es fácil ver de (1.31) que,

$$(1.37) \quad b_1 b_2 = -C^2 .$$

Ahora, de la ecuación de valores propios (1.24) que en este caso es:

$$(1.38) \quad \left| \begin{array}{c} M\omega^2 - D \\ \end{array} \right| \left(\begin{array}{c} a_1 \\ a_2 \end{array} \right) = 0 ,$$

y de la condición de normalización:

$$(1.39) \quad (a_1, a_2) \left(\begin{array}{c} a_1 \\ a_2 \end{array} \right) = a_1^2 + a_2^2 = 1$$

$$(1.40) \quad \bar{a}^1 = \frac{1}{\sqrt{C^2 + b_1^2}} \left(\begin{array}{c} -C \\ b_1 \end{array} \right)$$

$$(1.41) \quad \bar{a}^2 = \frac{1}{\sqrt{C^2 + b_2^2}} \left(\begin{array}{c} -C \\ b_2 \end{array} \right)$$

en donde \bar{a}^1 y \bar{a}^2 son los vectores propios respectivos de ω_1 y ω_2 y que cumplen con:

$$(1.42) \quad \bar{a}^1 \cdot \bar{a}^2 = 0 \text{ debido a (1.35), (1.36) y (1.37)}$$

De forma que hemos encontrado una base completa ortogonal para el problema, formada por los vectores \bar{a}^1 y \bar{a}^2 como columnas.

Sea \underline{S} la matriz formada por tales vectores representada en dicha base.

Esto es:

$$(1.43) \quad S = \begin{pmatrix} -\frac{C}{N_1} & -\frac{C}{N_2} \\ b_1 & b_2 \\ \frac{C}{N_1} & \frac{C}{N_2} \end{pmatrix},$$

donde hemos puesto:

$$(1.44) \quad N_1 = \sqrt{C^2 + b_1^2} \quad \text{y} \quad N_2 = \sqrt{C^2 + b_2^2}.$$

Veremos que esta matriz es unitaria,

$$(1.45) \quad |\underline{S}| = -\frac{Cb_2}{N_1N_2} + \frac{Cb_1}{N_1N_2} (b_1 - b_2),$$

pero:

$$(1.46) \quad \begin{aligned} N_1N_2 &= \sqrt{(C^2 + b_1^2)(C^2 + b_2^2)} \\ &= C \sqrt{(b_1 - b_2)^2} = C(b_1 - b_2), \end{aligned}$$

Por lo tanto la matriz (1.43) es unitaria.

$$(1.47) \quad |\underline{S}| = 1.$$

Para encontrar la inversa \underline{S}^{-1} , aplicamos la siguiente propiedad de las matrices unitarias,

$$(1.48) \quad \underline{S}^{-1} = (\underline{S})^* = \underline{S}^+,$$

donde $(\underline{S})^*$ es la traspuesta conjugada de \underline{S} y \underline{S}^+ la adjunta de \underline{S} .

La inversa es simplemente:

$$(1.49) \quad \underline{S}^{-1} = \begin{pmatrix} -C & b_1 \\ \frac{N_1}{N_1} & \frac{N_1}{N_1} \\ -C & b_2 \\ \frac{N_2}{N_2} & \frac{N_2}{N_2} \end{pmatrix},$$

podemos ahora realizar la transformación de similitud,

$$(1.50) \quad \underline{S}^{-1} \underline{D} \underline{S} = \underline{D}_d,$$

que nos proporciona la representación diagonal de hamiltoniano cuyos elementos diagonales son los eigenvalores ω_1 y ω_2 .

Esto es:

$$(1.51) \quad \underline{D}_d = \begin{pmatrix} M\omega_1^2 & 0 \\ 0 & M\omega_2^2 \end{pmatrix},$$

o bien,

$$(1.52) \quad \underline{D} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = M\omega_1^2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \underline{D} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = M\omega_2^2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

donde, $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ y $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ son los vectores propios en

esta nueva representación.

Aplicando la matriz \underline{S} dada por (1.43) recobramos \bar{a}^1 y \bar{a}^2 .

Es decir:

$$(1.53) \quad S \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \bar{a}^1 \quad \text{y} \quad S \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \bar{a}^2$$

Aplicando estos resultados a nuestro problema particular. Según las ecuaciones (1.32) y (1.33);

$$(1.54) \quad \omega_1^2 = \frac{\alpha}{2m} (3 + \sqrt{5})$$

$$(1.55) \quad \omega_2^2 = \frac{\alpha}{2m} (3 - \sqrt{5}).$$

Por consiguiente ω_1 y ω_2 son las frecuencias normales de vibración, podemos advertir que $\omega_1 > \omega_2$.

Al modo que corresponde a la frecuencia ω_1 , lo llamamos modo óptico, y al que concierne a ω_2 modo acústico, ya que las frecuencias de dichos modos corresponden al de la luz y al del sonido respectivamente, cuando las masas son los átomos de un sólido y las fuerzas de enlace son las fuerzas de cohesión entre ellos.

De las ecuaciones (1.40) y (1.41) para los vectores propios:

$$(1.56) \quad \bar{a}^1 = \begin{pmatrix} .85 \\ -.53 \end{pmatrix} \quad \bar{a}^2 = \begin{pmatrix} .53 \\ .85 \end{pmatrix} ,$$

y además;

$$(1.57) \quad a_x^1 + a_y^1 = (.85)^2 + (.53)^2 = 1$$

$$= a_x^2 + a_y^2 ,$$

que confirma la ortonormalidad de los modos de vibración.

Así tenemos los modos óptico y acústico, que representamos con flechas a escala en la figura 1.3.

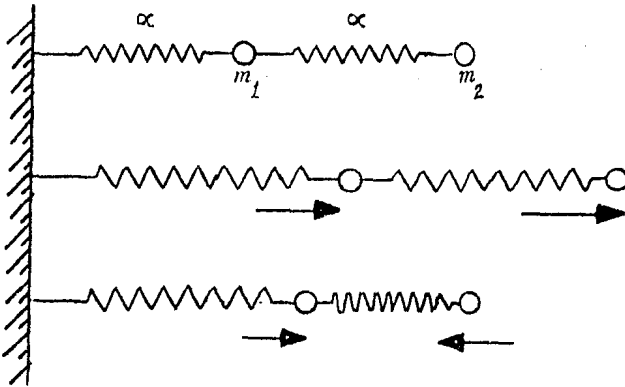


Fig. 1.3 Modos de vibración, para un sistema de dos masas iguales acopladas a dos resortes iguales con paredes en un extremo. La Fig. 1.3a representa el modo de vibración acústico. La fig. 1.3b el modo óptico.

Podemos apreciar el movimiento de las masas en el

modo acústico es en el mismo sentido pero con magnitudes diferentes en su desplazamiento. En cambio en el modo óptico las masas vibran en sentidos contrarios y también con diferente magnitud en sus desplazamientos, tal como nos dicen las ecuaciones (1.56).

ii) Ejemplo 2.

El siguiente ejemplo nos inicia en el estudio de vibraciones en dos dimensiones (Fig. 1.4). Veremos en este problema particular que implicaciones tiene en el movimiento de las masas en las direcciones X y Y, el hecho que tengamos enlaces acoplados perpendicularmente.

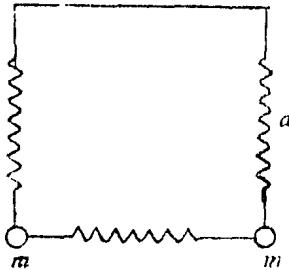


Fig. 1.4 Sistema de masas y resortes en dos dimensiones.

la energía potencial es:

$$(1.58) \quad V = \frac{1}{2} \alpha \bar{u}_1^2 + \frac{1}{2} \alpha \bar{u}_2^2 + \frac{1}{2} \alpha (\bar{u}_1 - \bar{u}_2)^2,$$

\bar{u}_1, \bar{u}_2 son los vectores desplazamiento;

$$\bar{u}_1 = (u_{1x}, u_{1y}); \quad \bar{u}_2 = (u_{2x}, u_{2y}).$$

Por lo tanto:

$$\bar{u}_1^2 = (u_{1X}^2 + u_{1Y}^2); \quad \bar{u}_2^2 = (u_{2X}^2 + u_{2Y}^2) \quad \text{y}$$

$$(1.59) \quad (\bar{u}_1 - \bar{u}_2)^2 = ((u_{1X} - u_{2X}), (u_{1Y} - u_{2Y}))^2,$$

Con estos resultados V toma la forma:

$$(1.60) \quad V = \alpha(u_{1X}^2 + u_{1Y}^2 + u_{2X}^2 + u_{2Y}^2 - u_{1X}u_{2X} - u_{1Y}u_{2Y})$$

En consecuencia, la matriz dinámica es:

$$(1.61) \quad D = \begin{pmatrix} 2\alpha & -\alpha & 0 & 0 \\ -\alpha & 2\alpha & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2\alpha & -\alpha \\ 0 & 0 & -\alpha & 2\alpha \end{pmatrix},$$

y la ecuación secular;

$$(1.62) \quad \begin{vmatrix} M\omega^2 - 2\alpha & \alpha & 0 & 0 \\ \alpha & M\omega^2 - 2\alpha & 0 & 0 \\ 0 & 0 & M\omega^2 - 2\alpha & \alpha \\ 0 & 0 & \alpha & M\omega^2 - 2\alpha \end{vmatrix} = 0$$

Esta forma tan particular de la matriz dinámica y de la ecuación secular nos indican que los movimientos en X no se acoplan con los movimientos en Y . También nos permite dividir la ecuación secular en bloques de 2×2 y entonces aplicar los resultados del ejemplo anterior.

De aquí que, por las ecuaciones para los valores propios (1.32) y (1.33).

$$(1.63) \quad M\omega_1^2 = \frac{1}{2} (A + B) + F = M\omega_3^2$$

$$(1.64) \quad M\omega_2^2 = \frac{1}{2} (A + B) - F = M\omega_4^2$$

o bien,

$$(1.65) \quad \omega_1 = \omega_3 = \sqrt{3\alpha/M} \quad ,$$

$$(1.66) \quad \omega_2 = \omega_4 = \sqrt{\alpha/M} \quad .$$

Estas son las frecuencias normales de vibración.

Podemos apreciar que este es un caso de estados degenerados doblemente. Para una misma frecuencia normal de vibración, corresponden dos estados propios o modos normales de vibración distintos, como lo confirmamos enseguida:

Sean \bar{a}^1 y \bar{a}^2 los vectores propios en cada bloque 2×2 , cuyos valores vienen expresados según las ecuaciones (1.40) y (1.41) que reescribimos,

$$(1.67) \quad \bar{a}^1 = \begin{pmatrix} -C \\ N_1 \\ b_1 \\ N_1 \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \bar{a}^2 = \begin{pmatrix} -C \\ N_2 \\ b \\ N_2 \end{pmatrix}$$

Entonces, los vectores propios expresados como vectores columna son:

$$(1.68) \quad \psi_I = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} a^1 \\ a^1 \end{pmatrix}, \quad \psi_{II} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} a^1 \\ -a^1 \end{pmatrix}$$

$$\psi_{III} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} a^2 \\ a^2 \end{pmatrix}, \quad \psi_{IV} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} a^2 \\ -a^2 \end{pmatrix}$$

Es decir:

$$(1.69) \quad \psi_I = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -C \\ b_1 \\ -C \\ b_1 \end{pmatrix}, \quad \psi_{II} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -C \\ b_2 \\ -C \\ b_2 \end{pmatrix}$$

$$\psi_{III} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -C \\ b_1 \\ C \\ -b_1 \end{pmatrix}, \quad \psi_{IV} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -C \\ b_2 \\ C \\ -b_2 \end{pmatrix}$$

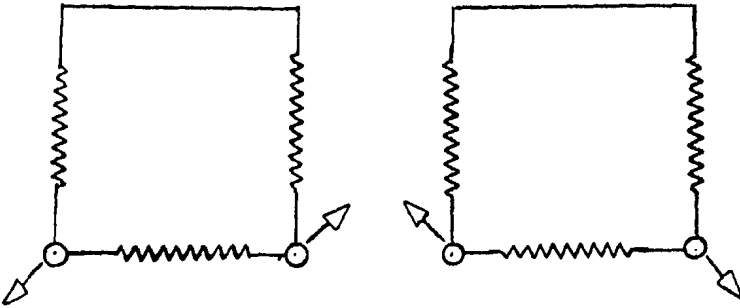
Reemplazamos los valores de C , b_1 , b_2 , tomados del determinante (1.61).

Y finalmente encontramos los modos normales:

$$(1.70) \quad \psi_I = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \psi_{II} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\psi_{III} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \psi_{IV} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

Los diagramas de la Fig. 1.5 nos sugieren el tipo de movimientos que tenemos en este sistema de acuerdo a los vectores propios que hemos encontrado.



Figuras 1.5a y 1.5b Modos acústicos de vibración, dados por los autovectores ψ_I y ψ_{III} .

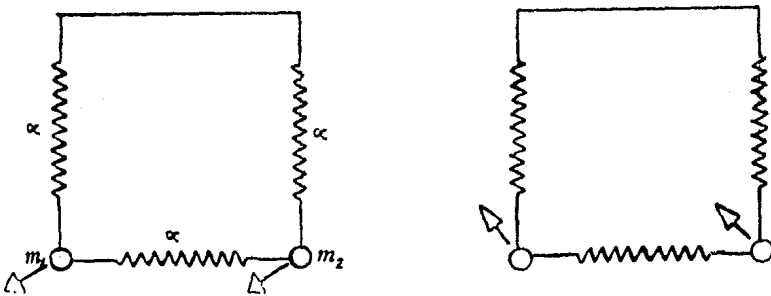


Fig. 1.5c y 1.5d Modos ópticos de vibración para los vectores propios expresados por ψ_{II} y ψ_{IV} .

Figura 1.5

a) Aquí las masas vibran en fase a la frecuencia ω_1 .

b) En este segundo modo acústico las masas vibran también en fase, a una frecuencia igual que la anterior pero en el sentido que indican las flechas.

c) En este primer modo óptico las masas vibran en fase a una frecuencia de ω_2 .

d) Esta figura representa el segundo modo óptico, las masas vibran en la fase a la misma frecuencia del modo anterior.

En los capítulos siguientes pasaremos ya el problema que nos ocupa: vibraciones en redes en una y dos dimensiones.

CAPITULO II. - LA CADENA LINEAL ORDENADA -
(Fuerzas Centrales)

2.1 LA CADENA FINITA

- 2.1.1 Con extremos fijos
- 2.1.2 Extremos libres
- 2.1.3 Cíclica
- 2.1.4 Método de la matriz de transferencia para la cadena cíclica

2.2 LA CADENA INFINITA

- 2.2.1 Análisis de la cadena lineal ordenada infinita a través de las Funciones de Green
- 2.2.2 Cálculo de la densidad de estados
- 2.2.3 Zona de Brillouin, curva de dispersión, frecuencia máxima

$$(2.3) \quad \frac{\partial^2 V}{\partial u_2^2} = 2\alpha, \quad \frac{\partial^2 V}{\partial u_3 \partial u_2} = -\alpha, \quad \frac{\partial^2 V}{\partial u_1 \partial u_2} = -\alpha$$

$$\frac{\partial^2 V}{\partial u_2 \partial u_3} = -\alpha, \quad \frac{\partial^2 V}{\partial u_1^2} = 2\alpha; \quad \frac{\partial^2 V}{\partial u_2 \partial u_1} = -\alpha; \quad \frac{\partial^2 V}{\partial u_3 \partial u_1} = 0$$

En forma explícita la matriz se escribe,

$$(2.4) \quad \begin{pmatrix} 2\alpha & -\alpha & & & 0 \\ -\alpha & 2\alpha & & & \\ 0 & & & & \\ & & & -\alpha & \\ 0 & & -\alpha & 2\alpha & \end{pmatrix} N, \quad ,$$

Tomando ceros en los sitios en blanco. Esta matriz es tridiagonal y simétrica, el subíndice indica el orden de la matriz.

La ecuación secular es:

$$(2.5) \quad |M_{\omega^2} - D| = \Lambda_N = 0, \quad ,$$

esto es:

$$(2.6) \quad \Lambda_N = \begin{vmatrix} m\omega^2 - 2\alpha & \alpha & 0 & \dots & 0 \\ \alpha & m\omega^2 - 2\alpha & \alpha & & \\ 0 & & & & \\ & & & 0 & \\ & & & \alpha & \\ 0 & & 0 & \alpha & m\omega^2 - 2\alpha \end{vmatrix} N,$$

nuevamente con ceros para los espacios vacíos.

Revolvemos el determinante para $N = 2, 3, 4, ;$
esto es,

$$A_2 = \begin{vmatrix} m\omega^2 - 2\alpha & \alpha \\ \alpha & m\omega^2 - 2\alpha \end{vmatrix} = (m\omega^2 - 2\alpha)^2 - \alpha^2,$$

$$A_3 = \begin{vmatrix} m\omega^2 - 2\alpha & \alpha & 0 \\ \alpha & m\omega^2 - 2\alpha & \alpha \\ 0 & \alpha & m\omega^2 - 2\alpha \end{vmatrix} = (m\omega^2 - 2\alpha)[(m\omega^2 - 2\alpha)^2 - \alpha^2] - \alpha^2(m\omega^2 - 2\alpha),$$

$$A_4 = \begin{vmatrix} m\omega^2 - 2\alpha & \alpha & 0 & 0 \\ \alpha & m\omega^2 - 2\alpha & \alpha & 0 \\ 0 & \alpha & m\omega^2 - 2\alpha & \alpha \\ 0 & 0 & \alpha & m\omega^2 - 2\alpha \end{vmatrix} = (m\omega^2 - 2\alpha)A_3 - \alpha^2[(m\omega^2 - 2\alpha)^2 - \alpha^2],$$

$$Y \quad A_4 = (m\omega^2 - 2\alpha)A_3 - \alpha^2 A_2.$$

Por lo tanto podemos escribir el valor del determinante en forma general como:

$$(2.7) \quad A_N = (m\omega^2 - 2\alpha) A_{N-1} - \alpha^2 A_{N-2} = 0;$$

Si definimos:

$$(2.8) \quad D_n = \frac{A_n}{a} ,$$

o bien,

$$(2.9) \quad A_n = D_n a^n ;$$

además si,

$$(2.10) \quad c = \frac{m\omega^2 - 2\alpha}{a} ,$$

La ecuación (2.7) se convierte en,

$$(2.11) \quad D_n = c D_{n-1} - D_{n-2} .$$

La forma de esta última expresión nos permite identificarla, con la fórmula de recurrencia para los polinomios U_N de Tchebyshev⁵ del tipo II, para las cuales se cumplen que:

$$(2.12a) \quad U_{N+1}(x) = 2xU_N(x) - U_{N-1}(x) ,$$

o bien,

$$(2.12b) \quad U_{N+1}(-x) = (2x)U_N(-x) - U_{N-1}(-x) ,$$

por lo tanto, podemos suponer que

$$(2.13) \quad D_N = U_N .$$

Por otro lado, ya que $c = \frac{m\omega^2}{a} - 2$

$$(2.14a) \quad c \geq -2$$

$$\text{donde, } \frac{m\omega^2}{a} \geq 0$$

se puede concluir que,

$$(2.14b) \quad c = -2x; \text{ donde,}$$

$$(2.15) \quad x = \cos \theta \text{ para } 0 \leq \theta \leq \pi$$

es decir

$$(2.16) \quad c = -2 \cos \theta$$

como se verá mas adelante $\omega^2 \leq \frac{4a}{m}$, de donde $c \leq 2$, y la definición $c = -2 \cos \theta$ para $0 \leq \theta \leq \pi$ se cumple perfectamente.

Podemos aprovechar la siguiente relación funcional para dichos polinomios:

$$(2.17) \quad U_N = \frac{\text{sen}(N+1)\theta}{\text{sen } \theta},$$

dado que $D_N = 0$ y por las ecuaciones (2.13) y (2.17), tenemos que,

$$(2.18) \quad \text{sen } (N+1)\theta = 0$$

y

$$(2.19) \quad \text{sen } \theta \neq 0;$$

las cuales se satisfacen cuando:

$$(2.20) \quad (N+1) = k\pi \text{ donde } k = 1, 2, 3, \dots, N,$$

lo que implica que:

$$(2.21) \quad \theta = \frac{k\pi}{N+1} \quad ,$$

o bien,

$$(2.22) \quad \cos\theta = \cos\left(\frac{k\pi}{N+1}\right) \quad .$$

De las expresiones para c dadas por (2.10) y (2.16).

$$(2.23) \quad \cos\left(\frac{k\pi}{N+1}\right) = -\left(\frac{m\omega^2 - 2\alpha}{2\alpha}\right)$$

para $k = 1, \dots, N$.

Esta es la ecuación de dispersión para la cadena lineal ordenada finita con paredes fijas.

De esta relación se puede observar que existen N frecuencias normales y por lo tanto, N modos normales correspondientes de vibración, a la vez N es en número de masas móviles que tenemos en la cadena.

Obsérvese que $k = 0$ no es un modo normal, lo que quiere decir que no se tiene en este caso el modo traslacional a frecuencia $\omega = 0$.

2.1.2 - LA CADENA LINEAL ORDENADA
FINITA CON EXTREMOS LIBRES -

Busquemos ahora las frecuencias normales de vibración para esta misma cadena lineal finita con N masas, pero esta vez sin paredes en sus extremos, ver figura 2.2. Consideramos nuevamente sólo interacciones a primeros vecinos y fuerzas centrales.

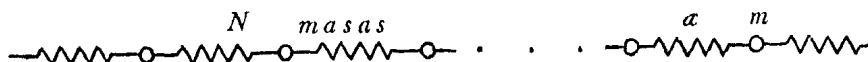


Fig. 2.2 Cadena Lineal ordenada finita con
extremos libres

La condición a la frontera para este caso es:

$$(2.25) \quad u_1 - u_0 = u_{N+1} - u_N = 0 ,$$

donde u_0 y u_{N+1} son los desplazamientos de las masas hipotéticas 0 y $N+1$.

Con lo cual el potencial toma la forma:

$$(2.26) \quad V = \sum_1^{N+1} \frac{\alpha}{2} (u_{i+1} - u_i)^2$$

De manera análoga el caso anterior, se calculan los términos de la matriz dinámica, esto es:

$$(2.27) \quad D = \begin{pmatrix} \alpha & -\alpha & & & 0 \\ -\alpha & 2\alpha & & & \\ & & & & 0 \\ & & -\alpha & 2\alpha & -\alpha \\ 0 & & 0 & -\alpha & \alpha \end{pmatrix} ;$$

con ceros en los espacios vacíos, fuera de los diagonales interiores

$$(2.28) \quad |\underline{\underline{M}}\omega^2 - \underline{\underline{D}}| = \begin{vmatrix} m\omega^2 - \alpha & \alpha & & & 0 \\ \alpha & m\omega^2 - 2\alpha & 0 & & \\ 0 & & & & 0 \\ & & & m\omega^2 - 2\alpha & \alpha \\ 0 & & \alpha & m\omega^2 - \alpha & \end{vmatrix} = 0$$

Retomamos de (2.10) el valor de c , con esta sustitución el determinante secular, que llamamos Δ se escribe:

$$(2.29) \quad \Delta = |\underline{\underline{M}}\omega^2 - \underline{\underline{D}}| = \begin{vmatrix} c+1 & 1 & & & \\ 1 & c & & & \\ & & & & \\ & & c & 1 & \\ & & 1 & c+1 & \end{vmatrix} = 0$$

Si calculamos el determinante para los primeros casos:

$$\Delta_2 = \begin{vmatrix} c+1 & 1 \\ 1 & c+1 \end{vmatrix} = c + 2c, \quad \Delta_3 = \begin{vmatrix} c+1 & 1 & 0 \\ 1 & c & 1 \\ 0 & 1 & c+1 \end{vmatrix},$$

$$\Delta_3 = c^3 + 2c^2 - c - 2,$$

$$\Delta_4 = \begin{vmatrix} c+1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & c & 1 & 0 \\ 0 & 1 & c & 1 \\ 0 & 0 & 1 & c+1 \end{vmatrix} = c^4 + 2c^3 - 2c^2 - 4c$$

Es decir:

$$\Delta_2 = c^2 + 2c = (c^2 - 1) + (2c) + 1,$$

$$\Delta_3 = c^3 + 2c^2 - c - 2 = (c^3 - 2c) + 2(c^2 - 1) + c$$

$$\Delta_4 = c^4 + 2c^3 - 2c^2 - 4c = (c^4 - 3c^2 + 1) + 2(c^3 - 2c) + (c^2 - 1).$$

Observamos que precisamente vamos obteniendo los polinomios U_N de Tchevychef del Tipo II, ya introducidos anteriormente; por lo tanto podemos generalizar para N , puesto que:

$$(2.30) \quad \Delta_N = U_N(c/2) + 2U_{N-1}(c/2) + U_{N-2}(c/2).$$

Si recordamos la relación (2.12) para dichos polinomios, esto es:

$$(2.31) \quad U_{N-2}(c/2) = -U_N(c/2) + c U_{N-1}(c/2)$$

y reemplazamos este valor en la ecuación (2.30)

nos queda,

$$(2.32) \quad \Delta_N = (2+c) U_{N-1}(c/2).$$

Ahora si volvemos a utilizar la relación funcional para los polinomios⁵ U_N dada por (2.17), así como el valor de c que nos proporciona (2.16), obtenemos:

$$(2.33) \quad \Delta_N = \frac{2\text{sen}N\theta}{\text{sen}\theta} (1-\cos\theta) = 0$$

Si consideramos cada uno de los factores igual a cero, podemos encontrar las condiciones para θ , del segundo factor en (2.33) se tiene que:

$$(2.34) \quad (1-\cos\theta) = 0,$$

$$(2.35) \quad \cos\theta = 1,$$

$$(2.36) \quad \theta = k\pi \quad \text{para } k = 0, 2, 4, \dots$$

en el intervalo $(0, \pi)$ tenemos sólo una frecuencia normal, pero en $\theta=0$, hay una indeterminación en (2.33) que se puede resolver de la siguiente manera.

Consideremos las siguientes fórmulas trigonométricas:

$$(2.37) \quad 1 - \cos \theta = 2 \text{sen}^2 \frac{\theta}{2}$$

Y

$$(2.38) \quad \text{sen } \theta = 2 \text{ sen } \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2}$$

por lo tanto (2.33) es:

$$(2.39) \quad \Delta_N = 2 \text{ sen } N\theta \frac{\text{sen } \theta/2}{\cos \theta/2} = 0,$$

o también,

$$(2.40) \quad \Delta_N = 2 \text{ sen } N\theta \tan \frac{\theta}{2} = 0.$$

Vemos que en $\theta = 0$, tanto $\text{sen } N\theta$ como $\tan \frac{\theta}{2}$ son cero, entonces $\theta=0$ es una solución de (2.33) y se tiene un modo normal para $\theta=0$.

En $\theta=\pi$ también existe una indeterminación, pero, debido a que la tangente en (2.40) se va al infinito, descartamos esta solución.

Por otro lado si tomamos el 1er. factor en (2.33),

$$(2.41) \quad 2 \text{ sen}(N\theta) = 0,$$

$$(2.42) \quad N\theta = 0,$$

o

$$(2.43) \quad N\theta = k\pi$$

$$(2.44) \quad \theta = \frac{k\pi}{N} \text{ para } k = 0, \dots, N-1,$$

hasta $N-1$ ya que $\theta=\pi$ no es una solución; como ya co-

mentamos en el párrafo anterior.

Finalmente combinamos los valores de c dados por las ecuaciones (2.10) y (2.16),

$$(2.45) \quad m\omega^2 = -2a\cos\theta + 2a$$

y aplicamos la condición (2.44) para $\theta = 0$

$$(2.46) \quad \omega_k^2 = \frac{2\pi}{m} \left(1 - \cos \frac{k}{N}\right) \text{ para } k = 0, \dots, N-1$$

Así, obtenemos los valores ω_k que representan las frecuencias normales de vibración.

La relación (2.46) nos indica que para la cadena lineal ordenada con extremos libres existen N frecuencias normales de vibración que corresponden a N modos normales de vibración, igual que en el caso de la cadena con extremos fijos, sólo que los valores para las frecuencias son diferentes; por lo tanto, los modos normales son distintos en cada caso.

En particular $\omega = 0$ es un modo normal que corresponde a aquél en que todas las masas se trasladan solidamente. A diferencia con la cadena de extremos fijos, para la cual no se obtuvo un modo normal con frecuencia igual a cero.

2.1.3 - LA CADENA CICLICA -

Ya que hemos resuelto el problema de las frecuencias normales para la cadena lineal finita, con extremos fijos y con extremos libres; es interesante estudiar a la cadena cíclica^{6,7} (que es equivalente a una cadena lineal unida en sus extremos, ver fig. 2.3). Visualizamos aquí la diferencia entre los modos de vibración, y se realiza un análisis análogo a los anteriores.

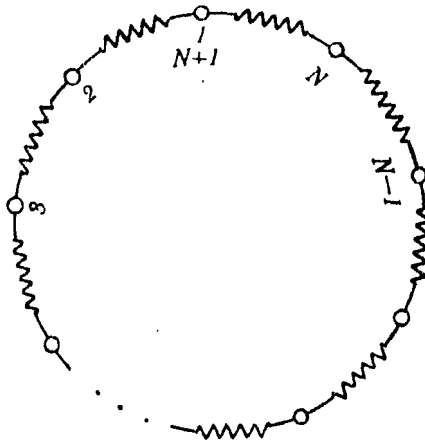


Fig. 2.3 Cadena Cíclica - Masas y resortes iguales enlazados en sus extremos formando una cadena cerrada.

De la figura (2.3) podemos observar que la condición a la frontera es

$$(2.47) \quad u_{N+1} = u_1 .$$

Por lo tanto la energía potencial esta dada por:

$$(2.48) \quad V = \frac{\alpha}{2} \sum_{i=1}^N (u_i - u_{i-1})^2 + \frac{\alpha}{2} (u_N - u_1)^2$$

donde, nuevamente las u 's son los desplazamientos y como siempre α la constante de las fuerzas; o bien utilizando la función δ de Kronecker,

$$(2.49) \quad \delta_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{si } i \neq j \\ 1 & \text{si } i = j \end{cases} ,$$

$$(2.50) \quad V = \frac{\alpha}{2} \sum_{i,j=1}^N (u_i - u_j)^2 \delta_{i,j+1} , \quad \text{ya que } u_1 = u_{N+1}$$

derivamos con respecto a los desplazamientos:

$$(2.51) \quad \frac{\partial V}{\partial u_n} = \frac{\alpha}{2} \sum_{i,j=1}^N 2(u_i - u_j) \left(\frac{\partial u_i}{\partial u_n} - \frac{\partial u_j}{\partial u_n} \right) \delta_{i,j+1}$$

$$= \alpha \sum_{ij}^N (u_i - u_j) (\delta_{in} - \delta_{nj}) \delta_{i,j+1}$$

por ejemplo:

$$\frac{\partial V}{\partial u_0} = \alpha(u_0 - u_1) + \alpha(u_0 - u_{n-1}) ,$$

además

$$(2.52) \quad \frac{\partial V}{\partial u_1 \partial u_0} = -\alpha, \quad \frac{\partial^2 V}{\partial u_0^2} = 2\alpha, \quad \frac{\partial^2 V}{\partial u_{N-1} \partial u_0} = -\alpha$$

Derivamos una vez más con respecto a los desplazamientos,

$$(2.53) \quad \frac{\partial^2 V}{\partial u_m \partial u_n} = \alpha \sum_{ij}^N (\delta_{im} - \delta_{jm}) (\delta_{in} - \delta_{jn}) (\delta_{i,j+1}),$$

o bien:

$$(2.54) \quad \frac{\partial^2 V}{\partial u_m \partial u_n} = \alpha \sum_{ij}^N (\delta_{i,m} \delta_{i,n} \delta_{i,j+1} - \delta_{j,m} \delta_{i,n} \delta_{i,j+1} - \delta_{im} \delta_{jn} \delta_{i,j+1} + \delta_{j,m} \delta_{j,n} \delta_{i,j+1})$$

Si sumamos sobre la i ,

$$(2.55) \quad \frac{\partial^2 V}{\partial u_m \partial u_n} = \alpha \sum_j [\delta_{m,n} - \delta_{j,m} \delta_{n,j+1} - \delta_{j,n} \delta_{m,j+1} + \delta_{j,m} \delta_{j,n}]$$

sumamos sobre j ,

$$(2.56a) \quad \frac{\partial^2 V}{\partial u_m \partial u_n} = \alpha (\delta_{m,n} - \delta_{m+1,n} - \delta_{m,n+1} + \delta_{m,n})$$

y finalmente, obtenemos el elemento D_{mn} de la matriz dinámica:

$$(2.56b) \quad \frac{\partial^2 V}{\partial u_m \partial u_n} = \alpha [2\delta_{mn} - (\delta_{m-1,n} + \delta_{m,n-1})]$$

$$(2.57) \quad \underline{\underline{D}} = \begin{pmatrix} 2\alpha & -\alpha & & & -\alpha \\ & -\alpha & 2\alpha & & \\ & & & & \\ & & & & -\alpha \\ -\alpha & & & -\alpha & 2\alpha \end{pmatrix} \quad N$$

La ecuación secular es:

$$(2.58) \quad R_N = \underline{\underline{M}}\omega^2 - \underline{\underline{D}} = \begin{vmatrix} m\omega^2 - 2\alpha & \alpha & & & \alpha \\ & \alpha & m\omega^2 - 2\alpha & & \\ & & & & \alpha \\ & & & & \\ \alpha & & & \alpha & m\omega^2 - 2\alpha \end{vmatrix} = 0 \quad N$$

Si recordamos que $c = \frac{m\omega^2 - 2\alpha}{\alpha}$,

$$(2.59) \quad R_N = \begin{vmatrix} c & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & c & 1 & & 0 \\ 0 & & & & \\ & & & & 1 \\ 1 & 0 & & 1 & c \end{vmatrix} = 0$$

donde N nuevamente marca el orden.

Para calcular este determinante, lo expresamos:

$$(2.60) \quad R_N = c A_{N-1} - B_{N-1} - (-1)^N C_{N-1},$$

donde, A_N es el determinante (2.6)

$$(2.61) \quad A_{n-1} = \begin{vmatrix} c & 1 & 0 & & 0 \\ & 1 & c & 1 & \\ & 0 & & & \\ & & & & 0 \\ & & & & 1 \\ 0 & & & 1 & c \end{vmatrix} \quad N-1$$

y

$$(2.62) \quad B_{n-1} = \begin{vmatrix} 1 & 1 & 0 & & 0 \\ & 0 & c & 1 & \\ & & 1 & & \\ & & & & 1 \\ 0 & & & 1 & c \end{vmatrix} \quad N-1$$

también

$$(2.63) \quad C_{N-1} = \begin{vmatrix} 1 & c & 1 & 0 & 0 \\ & 0 & 1 & c & \\ & & & & 1 \\ & 0 & & 1 & c \\ 1 & 0 & & 0 & c \end{vmatrix} \quad N-1$$

Calculemos este último determinante permutando el último renglón N veces hasta el primer renglón.

Es decir:

$$(2.64) \quad (-1)^N \begin{vmatrix} 1 & 0 & & 1 \\ & 1 & c & 1 \\ & 0 & 1 & c \\ & & & 1 \\ & 0 & & 1 & c \\ & & & & & 1 & c \\ & & & & & & & 0 \end{vmatrix} = (-1)^N [A_{N-2} + (-1)^N] \begin{vmatrix} 1 & c & 1 & 0 \\ & 0 & 1 & \\ & & & 1 & c \\ & & & & 0 & 1 \\ & & & & & & 0 & 1 \end{vmatrix}_{N-2}$$

El determinante de la extrema derecha (2.64) tiene ceros en el triángulo inferior, por lo tanto su valor es igual al producto de los elementos de la diagonal, que es uno.

Entonces:

$$(2.65) \quad C_{N-1} = (-1)^N [A_{N-2} + (-1)^N] = (-1)^N A_{N-2} + 1,$$

por otro lado:

$$(2.66) \quad B_{N-1} = A_{N-2} - E_{N-2} \quad \text{donde:}$$

$$(2.67) \quad E_{N-2} = \begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 & & 0 \\ & 0 & c & 1 & & 0 \\ & 0 & 1 & c & 1 & \\ & & & & & 1 \\ & 0 & & & & & 1 & c \end{vmatrix}$$

pero este determinante cumple con:

$$(2.68) \quad E_{N-2} = E_{N-3} = E_{N-4} = E_{N-5} = -(-1)^N$$

por lo tanto:

$$(2.69) \quad B_{N-1} = A_{N-2} + (-1)^N$$

de manera que

$$(2.70) \quad R_N = c A_{n-1} - A_{n-2} - (-1)^N - (-1)^N [(-1)^N A_{n-2} + 1],$$

es decir,

$$(2.71) \quad R_n = c A_{n-1} - A_{n-2} - (-1)^N - A_{n-2} - (-1)^N$$

finalmente el determinante secular es

$$(2.72) \quad R_n = c A_{n-1} - A_{n-2} - 2(-1)^N = 0$$

pero A_n es el determinante ya calculado antes y su valor es U_N según la ecuación (2.13), entonces:

$$(2.73) \quad 2\left(\frac{c}{2} U_{N-1} - U_{N-2}\right) = 2(-1)^N.$$

Si recurrimos a las siguientes propiedades para los polinomios de Tchevyshev de I y II tipo⁵,

$$(2.74) \quad T_N(x) = U_N(x) - xU_{N-1}(x)$$

y

$$(2.75) \quad T_N(x) = \frac{1}{2} [U_N(x) - U_{N-2}(x)],$$

tomamos otra vez $x = c/2$,

y la ecuación (2.73) nos queda:

$$(2.76) \quad (-1)^N = xU_{N-1} - U_{N-2},$$

sustituimos el valor xU_{N-1} dado por la relación (2.74) en esta última igualdad,

$$(2.77) \quad (-1)^N = -T_N(x) + U_N(x) - U_{N-2}(x),$$

finalmente por la relación (2.75),

$$(2.78) \quad (-1)^N = -T_N(x) + 2T_N(x),$$

o bien,

$$(2.79) \quad T_N(x) = (-1)^N.$$

Por otro lado sabemos que

$$(2.80) \quad T_N(x) = \cos N\theta,$$

entonces,

$$(2.81) \quad \cos N\theta = (-1)^N.$$

Cuando N es par,

$$(2.82) \quad \cos N\theta = 1,$$

lo que implica que:

$$(2.83) \quad N\theta = s \quad \text{para } s = 0, 2, 4, \dots, N,$$

o bien,

$$(2.84) \quad \theta = \frac{s\pi}{N}$$

si redefinimos

$$(2.85) \quad s = 2k,$$

la ecuación (2.84) es,

$$(2.86) \quad \theta = \frac{2k\pi}{N} \quad \text{para } k = 0, 1, 2, 3, \dots, \frac{N}{2}.$$

Pero por las ecuaciones (2.10) y (2.14)

$$(2.87) \quad m\omega^2 = -2\alpha \cos \theta + 2\alpha$$

y de la condición para θ dada por (2.10), finalmente tenemos la ecuación de dispersión,

$$(2.88) \quad \omega_k^2 = \frac{2\alpha}{m} \left[1 - \cos \frac{2k\pi}{N} \right] \quad k = 0, 1, 2, 3, \dots, \frac{N}{2}$$

Cuando N es impar, la ecuación (2.81) se convierte

en:

$$(2.89) \quad \cos N\theta = -1$$

y

$$(2.90) \quad N\theta = s\pi \text{ para } l = 1, 3, 5, \dots, N,$$

o bien,

$$(2.91) \quad \theta = \frac{s\pi}{N}, \text{ nuevamente redefinimos } s,$$

$$(2.92) \quad \theta = \frac{(2k-1)\pi}{N} \text{ para } k = 1, 2, 3, \dots, N/2$$

entonces de (2.10) y (2.16),

$$\omega_k = \frac{2\alpha}{m} \left[1 - \cos \frac{(2K-1)\pi}{N} \right]$$

$$\text{para } k = 1, 2, 3, \dots, \frac{N-1}{2}$$

Las relaciones de dispersión que obtuvimos en (2.88) y (2.93), nos muestran que sólo tenemos la mitad de las frecuencias normales en ambos casos. Este resultado puede parecer sorprendente a primera vista, pues esperamos un número de frecuencias igual al número de masas.

Esto obedece al hecho, de que estamos considerando sólo valores positivos para la k , ya que $\cos \theta = \cos (-\theta)$.

De tal manera que la frecuencia del modo k es igual a la frecuencia del modo $-k$ es decir; tenemos un caso de estados degenerados, a cada frecuencia corresponden dos modos normales, uno con vector de onda $+k$ y el otro con vector de onda $-k$. Esto significa que por cada onda que se propaga en el anillo, con la dirección de las manecillas del reloj, existe otra onda de propagación con la misma frecuencia, pero en la dirección contraria a las manecillas del reloj. Por lo tanto tenemos N modos normales.

2.1.4 - METODO DE LA MATRIZ DE TRANSFERENCIA PARA LA CADENA CICLICA -

Este nuevo tratamiento para la cadena cíclica, nos sirve para introducir el método de la Matriz de Transferencia^{7,8} que más tarde vamos también a utilizar en el caso de una cadena ordenada infinita.

En esencia, el método consiste en hallar una matriz que nos permita conectarnos de un sitio a otro aprovechando la periodicidad de la cadena.

Escribimos otra vez la ecuación del movimiento para la i -ésima masa

$$(2.95) \quad m\omega^2 u_i = - [(u_{i+1} - u_i) + (u_i - u_{i-1})] ,$$

para $i = 1, 2, \dots, N$,

Si definimos:

$$(2.96a) \quad d_i = u_{i+1} - u_i$$

y

$$(2.96b) \quad d_{i-1} = u_i - u_{i-1}$$

y sustituimos estas definiciones en nuestra ecuación de movimiento para la masa i dada por (2.95).

$$(2.97) \quad -\frac{m\omega^2}{a} u_i = (d_i - d_{i-1}) ,$$

o bien para la masa anterior,

$$(2.98) \quad -\frac{m\omega^2}{\alpha} u_{i-1} = (d_{i-1} - d_{i-2}).$$

Restamos estas dos últimas igualdades,

$$(2.99) \quad -\frac{m\omega^2}{\alpha} u_{i-1} = d_i - 2d_{i-1} + d_{i-2}.$$

Despejamos d_{i-2} de esta expresión,

$$(2.100) \quad d_{i-2} \left(-\frac{m\omega^2}{\alpha} + 2\right) = d_{i-1} - d_i,$$

reemplazamos este valor para d_{i-2} , en la ecuación (2.98)

$$(2.101) \quad d_i = \frac{m\omega^2}{\alpha} u_{i-1} - \left(\frac{m\omega^2}{\alpha} - 1\right) d_{i-1},$$

entonces transcribimos la ecuación (2.96b)

$$(2.102) \quad u_i = u_{i-1} + d_{i-1},$$

las ecuaciones (2.101) y 2.102) se pueden escribir en forma matricial,

$$(2.103) \quad T \Delta_{i-1} = \Delta_i,$$

que explícitamente se expresa como

$$(2.104) \quad \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \frac{m\omega^2}{\alpha} & \frac{m\omega^2+1}{\alpha} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{i-1} \\ d_{i-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_i \\ d_i \end{pmatrix}$$

Esto es, hemos obtenido una matriz de transferencia T , tal que aplicada a un vector asociado al sitio $i-1$ no ha transferido al vector análogo para el sitio siguiente. Para resolver el sistema descrito por (2.104), debemos encontrar los valores propios de T que llamamos λ , o sea resolver la ecuación secular.

$$(2.105) \quad \begin{vmatrix} (1-\lambda) & 1 \\ -\frac{m\omega^2}{\alpha} & (1-\lambda) - \frac{m\omega^2}{\alpha} \end{vmatrix} = 0$$

lo cual implica que:

$$(2.106) \quad (1-\lambda) = \frac{m\omega^2}{2\alpha} \pm \sqrt{\frac{m\omega^2}{2\alpha} \left(\frac{m\omega^2}{2\alpha} - 2 \right)}$$

Si definimos

$$(2.107) \quad \text{sen}^2 \beta = \frac{m\omega^2}{4\alpha}$$

la ecuación (2.106) se escribe

$$(2.108) \quad (1-\lambda) = 2 \text{sen}^2 \beta \pm 2_1 \text{sen} \beta \cos \beta ,$$

por lo tanto si empleamos las propiedades trigonométricas expuestas por las ecuaciones (2.37) y (2.38);

$$(2.109) \quad (1-\lambda) = 1 - \cos 2\beta \mp i \text{sen} 2\beta ,$$

o bien,

$$(2.110) \quad \lambda = \cos 2\beta \mp i \text{sen} 2\beta$$

$$(2.111) \quad \lambda = e^{\pm 2i\beta} .$$

Los eigenvalores para la masa N son entonces:

$$(2.112) \quad \lambda_{\pm}^N = e^{\pm 2iN\beta}$$

Debido a que estamos considerando la cadena cíclica, nuestra condición a la frontera implica que

$$(2.113) \quad T^N = I$$

y por lo tanto,

$$(2.114) \quad \text{Tr}(T)^N = \text{Tr}(I) = 2 ,$$

donde I es la matriz idéntica.

En otras palabras, la perturbación en el sitio $N+1$ es la misma que en el sitio 1 ;

pero,

$$(2.115) \quad T = \begin{pmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{pmatrix}$$

y por lo tanto,

$$(2.116) \quad \lambda_+^N + \lambda_-^N = 2 .$$

Si sustituimos el valor de λ dada por (2.111) tenemos,

$$(2.117) \quad e^{2iN\beta} + e^{-2iN\beta} = 2,$$

o bien,

$$(2.118) \quad 2 \cos 2N\beta = 2$$

lo que implica,

$$(2.119) \quad \cos 2N\beta = 1,$$

que se cumple para:

$$(2.120) \quad \beta = \frac{s\pi}{2N} \quad \begin{array}{l} \cos s\pi = 2, 4, 6, \dots, N \text{ si } N \text{ es par} \\ \cos s\pi = 2, 4, 6, \dots, N-1 \text{ si } N \text{ es impar} \end{array}$$

pero recordemos la definición de β dada por (2.10), entonces,

$$(2.121) \quad \sin^2 \beta = \frac{m\omega^2}{4\alpha} = \sin^2 \frac{s\pi}{2N},$$

es decir;

$$(2.122) \quad \omega^2 = \frac{4\alpha}{m} \sin^2 \left(\frac{s\pi}{2N} \right),$$

si aplicamos la propiedad trigonométrica,

$$(2.123) \quad \sin^2 \theta = \frac{1}{2} (1 - \cos \theta),$$

este último resultado nos queda:

$$(2.124) \quad \omega^2 = \frac{2\alpha}{m} \left(1 - \cos \frac{s\pi}{N} \right) \quad \begin{array}{l} \text{con } s = 2, 4, 6, \dots, N \\ \text{si } N \text{ es par} \end{array}$$

y con $s + 2, 4, 5, \dots, N-1$ si N es impar,

o bien,

$$(2.125) \quad \omega^2_k = \frac{2\alpha}{m} \left(1 - \cos \frac{2k\pi}{N} \right) \quad k = 0, 1, 2, 3, \dots, \frac{N}{2} \quad \text{para } N \text{ par}$$

y

$$(2.126) \quad \omega^2_k = \frac{2\alpha}{m} \left[1 - \cos \frac{(2k-1)\pi}{N} \right] \quad k = 1, 2, 3, \dots, \frac{N-1}{2}$$

para N impar.

Estas son precisamente las relaciones de dispersión (2.88) y (2.93) que obtuvimos usando los polinomios de Tchevychev; y por supuesto con la presencia de estados degenerados tal como ya lo comentamos anteriormente.

Es interesante ahora que hemos encontrado las expresiones para las frecuencias normales, visualizar los modos normales para nuestra cadena cíclica.

Por un lado, hemos encontrado que los valores permitidos para k , son de la forma

$$(2.127) \quad k = \frac{2n\pi}{Na}$$

dónde n es entero y a es la distancia entre las masas que supusimos igual a uno en nuestros ejemplos.

Pero recordemos del capítulo uno la ecuación (1.3)

$$(2.128) \quad k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

donde λ ya sabemos que representa la longitud de onda de la vibración.

Si designamos L como la longitud de la cadena

$$(2.129) \quad L = Na \quad \text{ya que } N \text{ es el número de masas,}$$

en consecuencia

$$(2.130) \quad \lambda = \frac{L}{n}$$

donde n es entero que nos da la condición para tener un modo normal.

Esto es, la longitud de onda λ debe ser un número entero de veces la longitud de la cadena, de tal manera que se puedan producir ondas estacionarias como se pueden apreciar en la figura 2.4.

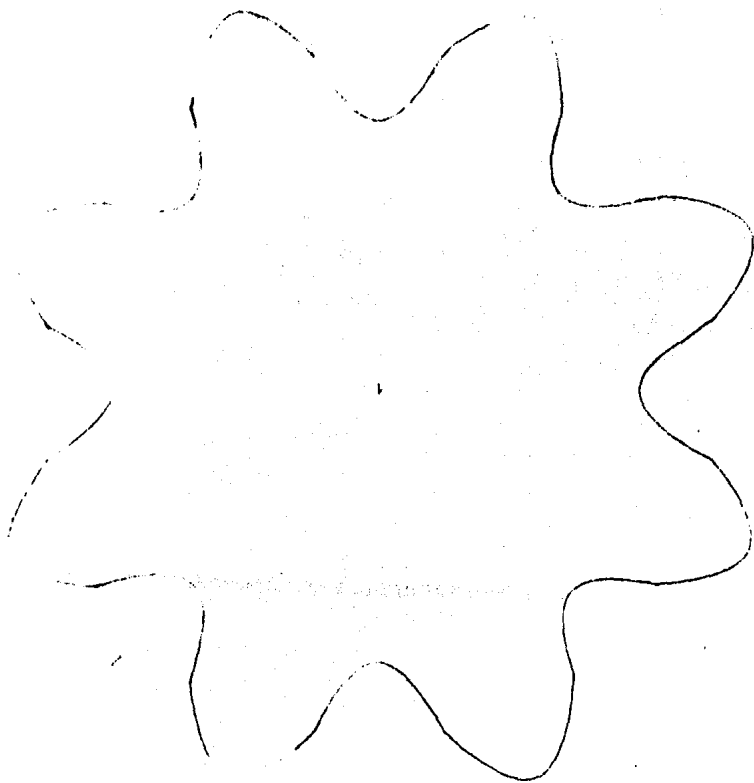


Fig. 2.4 EN ESTA FIGURA SE MUESTRA UNA ONDA ESTACIONARIA CUYA LONGITUD DE ONDA CABE UN NUMERO ENTERO DE VECES, (ocho) EN LA CADENA CICLICA, ES ASI COMO SE REPRESENTA UN MODO NORMAL.

2.2.1 - ANALISIS DE LA CADENA LINEAL
ORDENADA INFINITA -

Vamos a usar el método de la matriz de transferencia ya presentado en el caso finito, y además a realizar una transformada de Fourier que nos permita trabajar en el espacio k , para encontrar la ecuación de dispersión para la cadena lineal ordenada infinita^{9, 10}.

Posteriormente, introducimos el método de las funciones de Green que como veremos nos proporciona un camino muy simple e inmediato para encontrar la densidad de estados.

Las ecuaciones de movimiento para las masas $i, i+1$ son:

$$(2.131) \quad -\frac{m\omega^2}{a} u_i = (u_{i+1} - u_i) + (u_{i-1} - u_i) ,$$

$$(2.132) \quad -\frac{m\omega^2}{a} u_{i+1} = (u_{i-2} - u_{i+1}) + (u_i - u_{i-1})$$

donde las u 's siguen siendo los desplazamientos.

Si definimos t que nos transfiere del sitio i al sitio $i+1$, esto es

$$(2.133) \quad t_i u_i = u_{i+1}$$

y

$$(2.134) \quad A = -\left(\frac{m\omega^2}{a} - 2\right) = -c$$

la ecuación de movimiento (2.131) se puede expresar como:

$$(2.135) \quad Au_i = u_{i+1} + u_{i-1} .$$

Si dividimos entre u_i ,

$$(2.136) \quad A = t_i + \frac{1}{t_{i-1}} ,$$

o bien,

$$(2.137) \quad A t_{i-1} = t_i t_{i-1} + 1.$$

Por otro lado realizando una transformada de Fourier al espacio k ,

$$(2.138) \quad u_n = e^{i(kna - \omega t)}$$

y por la condición (2.133),

$$(2.139) \quad \beta e^{i[k(n+1)a - \omega t]} = t\beta e^{i(kna - \omega t)}, \text{ donde } \beta \text{ es la amplitud,}$$

en consecuencia,

$$(2.140) \quad t = e^{ika}$$

y

$$t^{-1} = e^{-ika}.$$

Si sustituimos los valores de t y t^{-1} en la ecuación

(2.136) obtenemos que:

$$(2.142) \quad A = t + t^{-1} = e^{ika} + e^{-ika} = 2 \cos ka,$$

pero A está dada por (2.134), por lo tanto

$$(2.143) \quad \frac{m\omega^2}{\alpha} - 2 = -2 \cos ka$$

o bien

$$(2.144) \quad \omega(k) = \frac{2\alpha}{m} (1 - \cos ka)^{1/2}.$$

Esta es la relación de dispersión para la cadena lineal ordenada infinita.

Por otro lado, debido a que todos los sitios son equivalentes, podemos escribir

$$(2.145) \quad t_i = t_{i-1} = t$$

y de la ecuación, (2.137)

$$(2.146) \quad At = t^2 + 1$$

es decir:

$$(2.147) \quad t = \frac{1}{2}(A \pm \sqrt{A^2 - 4})$$

el radical $\sqrt{A^2 - 4}$ en esta última ecuación contribuye a la densidad de estados si es negativo, es decir

$$(2.149) \quad A^2 = 4$$

por tanto,

$$(2.150) \quad \left(\frac{m\omega^2}{\alpha} - 2\right)^2 = 4$$

lo que implica

$$(2.151) \quad -2 \leq \left|\frac{m\omega^2}{\alpha} - 2\right| \leq 2$$

es decir;

$$(2.152) \quad \frac{m\omega^2}{\alpha} = 0$$

y

$$(2.153) \quad \omega = 0$$

en un caso, o bien

$$(2.154) \quad \frac{m\omega^2}{\alpha} = 4 \quad \text{en el otro caso,}$$

que corresponden a la frecuencia máxima de vibración, esto es

$$(2.155) \quad \omega_{\max} = 2 \sqrt{\frac{\alpha}{m}}$$

Un estudio completo sobre el problema de vibraciones, comprende conocer los modos de vibración para tener información sobre la densidad de estados que a su vez vamos a requerir para conocer la energía interna del sistema o su calor específico y algunas otras variables experimentales. Obtener los modos normales involucra un problema de valores propios. Es en general muy complicado resolver un problema dado en forma directa, en este caso, diagonalizar una matriz

infinita. Existen otros métodos desarrollados en mecánica cuántica y teoría de muchos cuerpos que permiten extraer in formación sobre:

- a) La dinámica de variables experimentales.
- b) La densidad de estados excitados del sistema.
- c) Las propiedades de las funciones de correlación, y por lo tanto, fenómenos de dispersión y propiedades de respuesta del sistema;

sin tener la necesidad de conocer las funciones propias.

Uno de los métodos a que nos referimos es el de las funciones de Green^{11,12,13}. Incluso útil también para describir sistemas desordenados y encontrar la densidad de estados en tales sistemas. Vamos a requerir la función de Green retardada G_r que hemos estudiado en el apéndice A1, donde también encontramos la ecuación de movimiento (A1.28) que reescribimos aquí:

$$(2.156) \quad M_a(l) \omega^2 G_{a\alpha}(l, l'; \omega) = \delta_{\alpha\alpha}(l, l') + \\ + \sum_{l''} \phi(l, l'') G_{a''\alpha}(l'', l, \omega) \alpha'' l'' ,$$

recordemos que las l son los sitios, las a 's especifican los ejes coordenados y que M es la matriz de las masas.

En particular para nuestro problema,

$$(2.157) \quad M_a(l) = M ,$$

debido a que todas las masas son iguales, y podemos escribir la ecuación de movimiento en forma condensada:

$$(2.158) \quad [M\omega^2 - \phi] G(\omega) = I$$

donde I es la matriz identidad y ϕ es la matriz dinámica.

También para este problema, podemos reconocer que $\alpha = x$ por lo tanto G es isotrópica y podemos suprimir los índices para reemplazarlos en denotar los sitios.

Entonces, en forma explícita la ecuación de movimiento es:

$$(2.159) \quad M\omega^2 G_{00} = 1 + 2\alpha G_{01} + 2\alpha G_{00},$$

$$(2.160) \quad M\omega^2 G_{01} = \alpha G_{00} + \alpha G_{02} + 2\alpha G_{01},$$

$$(2.161) \quad M\omega^2 G_{03} = \alpha G_{02} + \alpha G_{02} + 2\alpha G_{01}$$

$$(2.162) \quad M\omega^2 G_{0n} = \alpha G_{0n-1} + \alpha G_{0,n+1} + 2\alpha G_{0n}.$$

La forma recurrente de estas expresiones nos lleva a definir las matrices de transferencia.

$$(2.163) \quad K_1 G_{00} = G_{01},$$

$$(2.164) \quad K_2 G_{01} = G_{02}$$

o en general

$$(2.165) \quad K_n = \frac{G_{01}}{G_{0n-1}}$$

Esta matriz K depende del sitio que escogemos; pero

si la cadena es infinita, todos los sitios son equivalentes, entonces:

$$(2.166) \quad K_n = K \quad \text{para toda } n.$$

Por las ecuaciones (2.165) y (2.166) la ecuación (2.162) toma la forma:

$$(2.167) \quad (M\omega^2 - 2K)K = \alpha + \alpha K^2, \quad ,$$

ya que

$$(2.168) \quad \frac{G_{0,n+1}}{G_{0,n-1}} = \frac{G_{0,n+1}}{G_{0,n}} = \frac{G_{0n}}{G_{0n-1}} = K^2, \quad ,$$

resolvemos para K la ecuación (2.167),

$$(2.169) \quad K = \frac{1}{2\alpha} \left[M\omega^2 - 2\alpha \pm \sqrt{(M\omega^2 - 2\alpha)^2 - 4\alpha^2} \right], \quad ,$$

por la ecuación (2.165) podemos reescribir la ecuación (2.153),

$$(2.170) \quad M\omega^2 - 2\alpha = \frac{1}{G_{00}} + 2\alpha K,$$

o bien

$$(2.171) \quad G_{00} = \frac{1}{M\omega^2 - 2\alpha(1+K)}$$

si reemplazamos el valor de K dado por (2.169) tenemos,

$$(2.172) \quad 1 + K = \frac{1}{2\alpha} \left(M\omega^2 \pm \sqrt{(M\omega^2 - 2\alpha)^2 - 4\alpha^2} \right), \quad ,$$

finalmente,

$$(2.173) \quad G_{00} = \frac{1}{\pm M \sqrt{(\omega^2 - \omega_{\max}^2)}} ,$$

o bien,

$$(2.174) \quad G_{00} = \frac{1}{\pm M (\omega^2 - \omega_{\max}^2)^{1/2}}$$

si recordamos la expresión (2.154) para ω_{\max} .

Esta es la traza de la función de Green para la cadena lineal que nos va a servir para calcular la densidad de estados.

2.2.2 - CALCULO DE LA DENSIDAD DE ESTADOS
A TRAVES DE LAS FUNCIONES DE GREEN -

La densidad de estados $\rho(\omega)$ se define como el número de estados por intervalo unidad de frecuencia, una forma alternativa de escribirla es:

$$(2.175) \quad \rho(\omega) = \frac{1}{N} \sum_i \delta(\omega - \omega_i)$$

El teorema de Cauchy¹⁴ nos permite escribir $\delta(\omega - \omega_i)$ como:

$$(2.176) \quad \delta(\omega - \omega_i) = -\frac{1}{\pi} \sum_i \text{Im} \left(\frac{1}{\omega - \omega_i} \right)$$

Por esto la definición (2.175) es:

$$(2.177) \quad \rho(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left(\frac{1}{N} \sum_i \frac{1}{\omega - \omega_i} \right)$$

reescribimos la ecuación (2.174) para la función de Green,

$$(2.178) \quad G_{ii} = \frac{1}{M(\omega^2 - \omega_i^2)} = \frac{1}{2\omega M} \left(\frac{1}{\omega + \omega_i} + \frac{1}{\omega - \omega_i} \right),$$

el sumando que nos interesa de esta última igualdad es $\frac{1}{\omega - \omega_i}$ puesto que éste es siempre mayor que cero,

por lo tanto,

$$(2.179) \quad \frac{1}{\omega - \omega_i} = 2M\omega G_{ii}$$

y la densidad de estados $\rho(\omega)$ es ahora

$$(2.180) \quad \rho(\omega) = -\frac{2M\omega}{\pi} \operatorname{Im} \frac{1}{N} \sum_i G_{ii}$$

pero

$$(2.181) \quad \frac{1}{N} \sum_i G_{ii} = \operatorname{Tr} G$$

donde $\operatorname{Tr} G$ es la traza de la matriz G , finalmente entonces, la ecuación (2.180) nos queda:

$$(2.182) \quad \rho(\omega) = -\frac{2M\omega}{\pi} \operatorname{Im} \operatorname{Tr} G .$$

Para el caso que estamos tratando de la cadena lineal infinita, debemos tomar en cuenta la ecuación (2.174) entonces, la densidad de estados es:

$$(2.183) \quad \rho(\omega) = \frac{1}{(\omega^2 - \omega_{\max}^2)^{1/2}}$$

donde ω_{\max} se calculó en la primera parte de esta sección y esta dada por la ecuación (2.155).

En la figura 2.5 mostramos la curva de $\rho(\omega)$ para la cadena lineal según (2.183).

Hemos visto como el método de las funciones de Green ofrece grandes ventajas para resolver la cadena ordenada, puesto que encontramos en forma inmediata la densidad de estados.

Debemos aclarar algunos puntos importantes en relación a la curva de la densidad de estados de la figura 2.5.

a) Esta curva corresponde al caso infinito con interacciones a primeros vecinos. Como se puede apreciar tenemos una curva continua a diferencia de los casos finitos; donde la densidad de estados va a depender del número de masas N y las gráficas de densidad correspondientes, son en realidad histogramas como se puede verificar en las relaciones de dispersión, que ya calculamos para estos casos.

b) La curva presenta una singularidad para ω_{\max} que nos confirma que no podemos tener estados más allá de esta frecuencia.

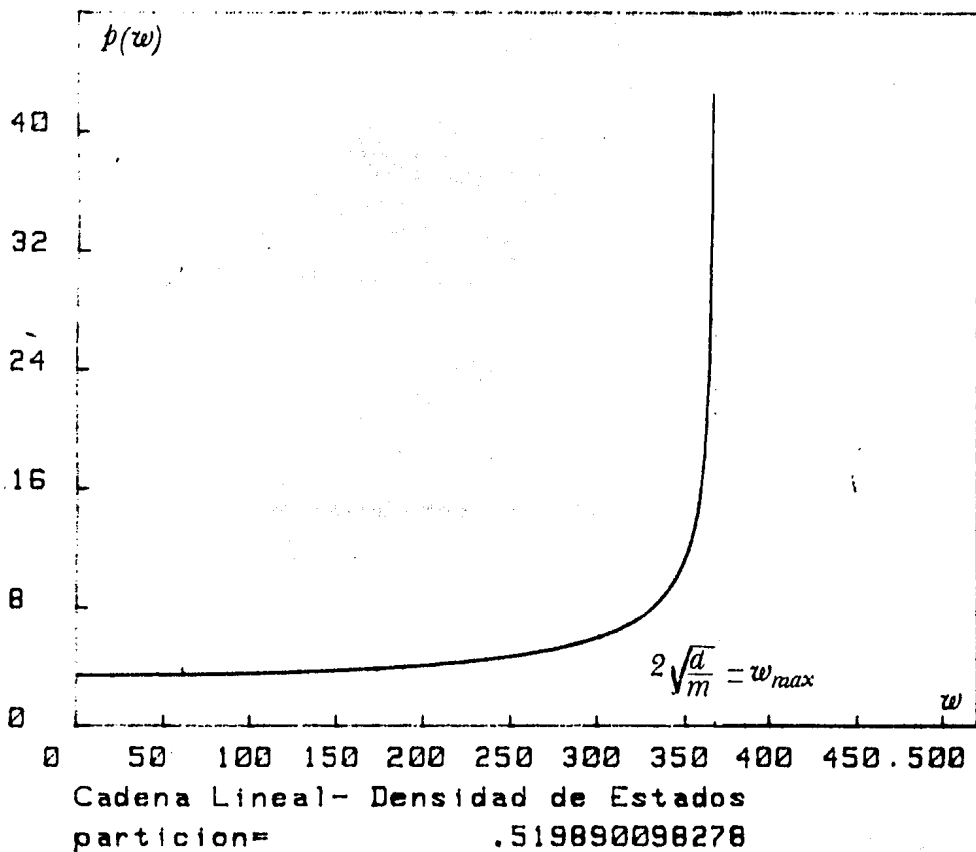


Fig. 2.5 Curva de la densidad de estados para la cadena lineal ordenada infinita.

2.2.3 - CURVAS DE DISPERSION. FRECUENCIA DE CORTE. ZONA DE BRILLOUIN. -

Hemos encontrado en la ecuación (2.144), la relación de dispersión para la cadena lineal infinita, al igual que en los casos finitos es una función de $\omega(\bar{k})$ u $\omega^2(\bar{k})$. Las gráficas correspondientes reciben el nombre de curvas de dispersión. En la fig. 2.6 mostramos una gráfica de ω vs \bar{k} para la cadena lineal infinita. Observamos en ella que la $\omega_{\bar{k}}(\bar{k})$ es una función periódica, con período 2π ; esto es, la frecuencia toma el mismo valor cada vez que k aumenta en 2π . Este comportamiento periódico nos permite establecer una región en el espacio de las k 's de $-\pi/a$ a π/a , que nos basta para describir las propiedades de nuestro sistema. Es así como se define la 1a. zona de Brillouin para la cadena lineal (ver figura 2.6).

En dicha región se localiza un máximo de la curva, para $k = \pi/a$, cuyo valor de frecuencia es la frecuencia máxima o frecuencia de corte, que nosotros hemos obtenido analíticamente y viene dada según (2.155). La frecuencia máxima o frecuencia de corte corresponde al modo en el cual las masas vibran en antifase como se demuestra en la fig. 2.7. Si obligamos a nuestro sistema a vibrar a una frecuencia mayor a ésta, la perturbación decae en el tiempo y en el espacio.

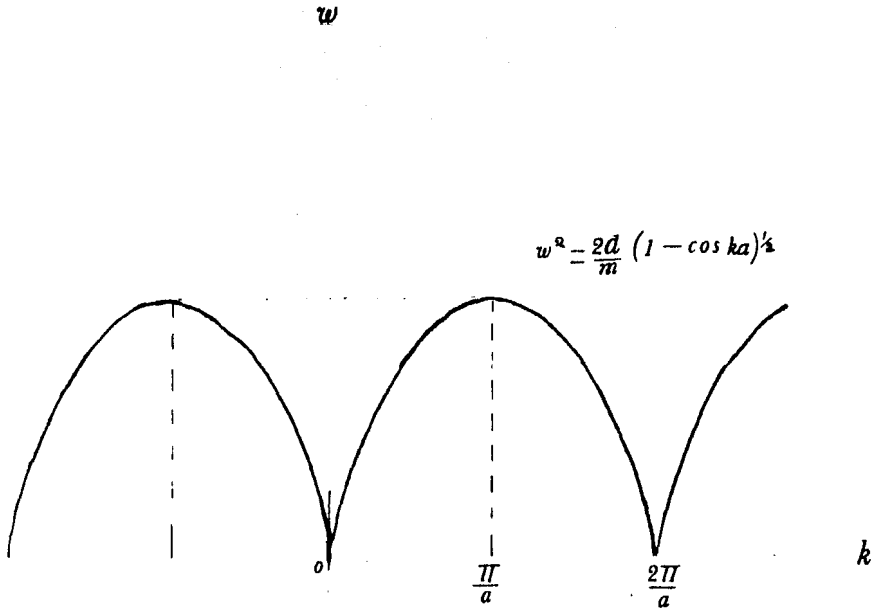


Fig. 2.6 Frecuencias normales de vibración para la cadena lineal ordenada. La línea punteada distingue la 1.ª zona de Brillouin.

Podemos observar que la curva muestra un período de $2\pi/a$, de tal forma que no necesitamos definir k fuera de esta región, que constituye la primera zona de Brillouin,

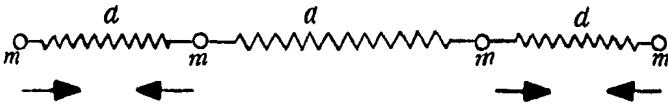


Fig. 2.7 Masas vibrando en antifase. Este modo normal corresponde a la frecuencia normal máxima.

Con estos comentarios damos por concluido el problema unidimensional de las vibraciones en arreglos ordenados. Abordaremos en los capítulos siguientes, el problema en dos dimensiones.

CAPITULO III, LA RED CUADRADA

3.1 Ecuación de Movimiento. Relación de dispersión. Zona de Brillouin. Curva de dispersión. Frecuencia de corte.

3.2 Cálculo de la densidad de estados para la red cuadrada.

3.1 - ECUACION DE MOVIMIENTO. RELACION
DE DISPERSION. ZONA DE BRILLOUIN.
CURVA DE DISPERSION. FRECUENCIA
DE CORTE. -

El propósito en este capítulo, es tratar el mismo problema de oscilaciones, ahora en una red de dos dimensiones. Al igual que en el caso unidimensional, estamos interesados en encontrar las frecuencias normales de vibración, las curvas de dispersión en la primera zona de Brillouin y la densidad de estados. Estos resultados nos permiten conocer completamente el comportamiento físico del sistema.

El método a seguir es análogo al usado anteriormente, que consiste en resolver un sistema lineal de ecuaciones diferenciales. Consideramos nuevamente masas y resortes iguales y sólo interacciones a primeros vecinos. Planteamos las ecuaciones de movimiento que rigen al sistema y observamos que existe simetría traslacional, en el sentido de que el sistema completo es invariante ante una traslación por una distancia dada por el vector de la red. Aprovechamos dicha simetría traslacional y hacemos uso del teorema de Bloch, entonces trabajamos en el espacio \bar{k} , donde el problema se simplifica considerablemente; ya que del sistema infinito de ecuaciones que tenemos, se nos reducen a bloques idénticos de baja dimensión.

LA RED CUADRADA

Consideremos un arreglo infinito de masas idénticas unidas por resortes iguales de constante a , tanto en filas como en columnas, formando una red cuadrada (ver fig. 3.1).

Para analizar las vibraciones en dicha red, situamos el arreglo dentro de un sistema cartesiano, de modo tal, que cada masa queda colocada en la pareja $a(\ell, m)$ (para, ℓ y m enteros), separados una distancia a como se muestra en la misma figura.

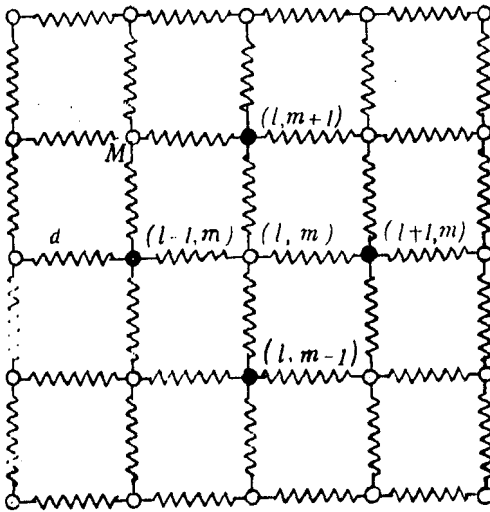


Fig. 3.1 Red cuadrada

Cada partícula M está situada en las parejas de enteros (ℓ, m) de un sistema cartesiano.

Los sitios etiquetados contiguos corresponden a los primeros vecinos de M. Las masas dibujadas en círculos oscuros corresponden a estos sitios.

Si tomamos una masa arbitraria en el punto $a(\ell, m)$, las masas ligadas directamente a ésta están colocadas en los puntos $a(\ell+1, m)$; $a(\ell-1, m)$; $a(\ell, m+1)$. Por lo tanto la fuerza \bar{F} que siente la masa en $a(\ell, m)$ es la suma vectorial de las fuerzas producidas por los cuatro resortes ligados a ella; ya que consideramos interacciones sólo a primeros vecinos, esto es:

$$(3.1) \quad \bar{F}_{T(\ell, m)} = \bar{F}_{\ell, m}^{\ell+1, m} + \bar{F}_{\ell, m}^{\ell-1, m} + \bar{F}_{\ell, m}^{\ell, m+1} + \bar{F}_{\ell, m}^{\ell, m-1}$$

aplicamos la ley de Hooke a cada resorte,

$$(3.2) \quad \bar{F}_{a, b}^{c, d} = -\alpha(\bar{u}_{a, b} - \bar{u}_{c, d})$$

donde las u 's siguen siendo los desplazamientos de masas de su posición de equilibrio,

entonces la ecuación de movimiento para la partícula mas M situada en (ℓ, m) es:

$$(3.3.) \quad \bar{F}_{T(\ell, m)} = M \frac{d^2 \bar{u}_{\ell, m}}{dt^2} = \alpha [(\bar{u}_{\ell+1, m} + \bar{u}_{\ell-1, m} - 2\bar{u}_{\ell, m}) + (\bar{u}_{\ell, m+1} + \bar{u}_{\ell, m-1} - 2\bar{u}_{\ell, m})].$$

Así hay una expresión para cada masa del arreglo, por

lo tanto, tenemos un conjunto infinito de ecuaciones diferenciales acopladas, sin embargo, en vista de la simetría traslacional de la red, recurrimos al Teorema de Bloch, y escribimos:

$$(3.4) \quad u_{\ell, m} = u(0) e^{i(\ell k_x a + m k_y a - \omega t)},$$

que es una transformación al espacio \bar{k} , donde \bar{k} es un vector en el espacio de la red recíproca, recordemos que si la red tiene como vectores básicos \bar{a} y \bar{b} en la red primitiva, los vectores que definen la red recíproca \bar{A} y \bar{B} están dados por:

$$(3.5a) \quad \bar{A} = 2\pi \frac{\bar{b}}{|\bar{a}| \cdot |\bar{b}|}$$

y

$$(3.5b) \quad \bar{B} = 2\pi \frac{\bar{a}}{|\bar{a}| \cdot |\bar{b}|}, \quad \text{entonces}$$

$$(3.6) \quad \bar{k} = \alpha \bar{A} + \beta \bar{B} \quad \text{que es el espacio en el que vamos a trabajar}$$

Para encontrar la relación de dispersión, sustituimos la solución propuesta (3.4) en la ecuación de movimiento (3.3), esto es:

$$\begin{aligned}
 (3.7a) \quad -M\omega^2 u(0) e^{i(ik_x a + mk_y a - \omega t)} &= \alpha \bar{u}(0) \left[e^{ik_x a} e^{ik_x a} e^{mk_y a} + \right. \\
 & e^{ik_x a} e^{-ik_x a} e^{mk_y a} - \\
 & -2e^{ik_x a} e^{imk_y a} + e^{ik_x a} e^{imk_y a} e^{ik_y a} , \\
 & + e^{ik_x a} e^{imk_y a} e^{-ik_y a} - \\
 & \left. -2e^{ik_x a} e^{imk_y a} \right] e^{-i\omega t} ,
 \end{aligned}$$

dividimos cada miembro entre la expresión (3.4),

$$M\omega^2 = -\alpha [e^{ik_x a} + e^{-ik_y a} - 2 + e^{ik_y a} + e^{ik_y a} - 2]$$

usamos la propiedad (3.7b) $\cos \theta = \frac{e^{i\theta} + e^{-i\theta}}{2}$

finalmente tenemos:

$$(3.8a) \quad M\omega^2 = 2\alpha(2 - \cos k_x a - \cos k_y a) ,$$

esta es la relación de dispersión para la red cuadrada, de donde vemos que los modos de vibración están desacoplados en X y en Y. Esto significa que no tenemos modos transversales, y es debido a que tratamos con un sistema simétrico en X y en Y de fuerzas centrales.

La relación de dispersión (3.8a) que hemos obtenido, involucra a la función coseno, que es periódica, por lo tanto $\omega(\vec{k})$ también lo es, y además es multivaluada. Es claro entonces que basta representar el dominio de valores de \vec{k} en la región $-\pi/a$ a π/a para reproducir las frecuencias normales. Esto es; en virtud de la simetría traslacional, hemos transferido nuestro problema al espacio \vec{k} , donde la región de estudio consiste en un sólo cuadrado de lado $2\pi/a$, así queda construida la 1a. zona de Brillouin, del espacio \vec{k} para la red cuadrada (ver figura 3.2).

Podemos entonces graficar $\omega(\vec{k})$ vs (\vec{k}) dentro de la primera zona de Brillouin y obtener la curva de dispersión. Es suficiente considerar el primer cuadrante de la primera zona de Brillouin, y es usual tomar las trayectorias de los puntos particulares: del punto $(0,0)$ al punto X $(0, \pi/a)$; de X al punto L $(\pi, \pi/a)$ finalmente de L a Γ , que son los puntos de alta simetría en la primera zona de Brillouin, que corresponden a los extremales de la relación de dispersión como se ve en la figura (3.3) donde se muestra la curva de dispersión, que se obtuvo con la ec. (3.8a).

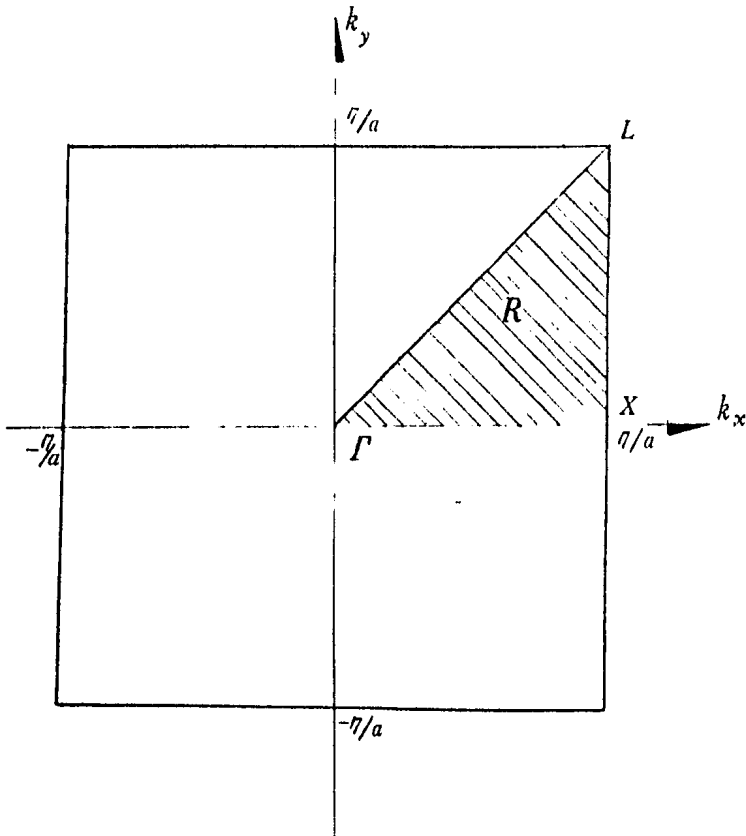
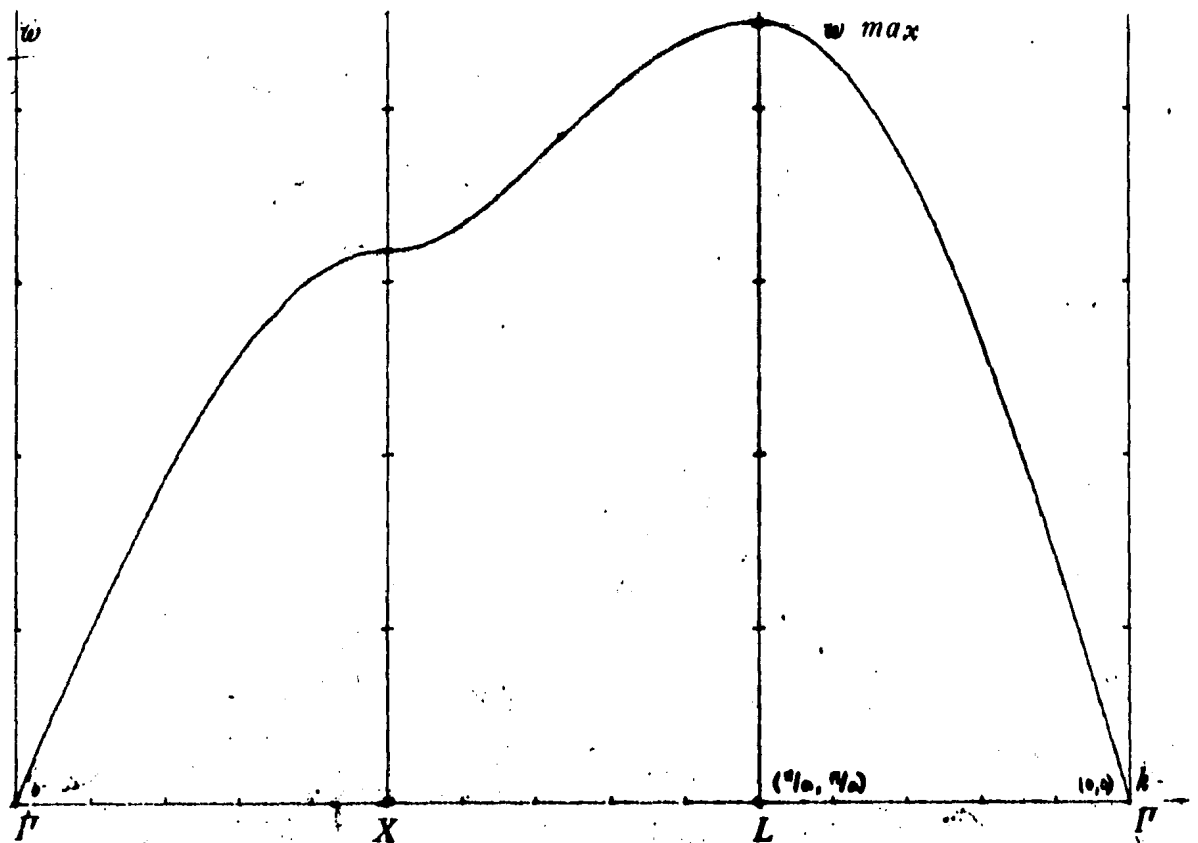


Fig. 3.2 1a. Zona de Brillouin para la red cuadrada

La 1a. zona de Brillouin es un cuadrado de lado $2\pi/a$; también se muestran los puntos de alta simetría en los bordes de la zona de Brillouin, y la región R que vamos a requerir para sumar estados.

Fig. 3.3. Curva de dispersión de la red cuadrada



Dependencia de la frecuencia de oscilación respecto del número de onda, para una red cuadrada ordenada. Esta curva representa la relación de dispersión (3.8a) y se obtuvo a partir de un cálculo numérico.

Hemos encontrado resultados semejantes a los obtenidos para el caso unidimensional, esto es debido claro, a la periodicidad. Tenemos una relación de dispersión y también un valor de frecuencia máxima de oscilación del sistema. Este corresponde al máximo de la curva de dispersión (ver figura 3.3), y se determina a partir de la ecuación (3.8a) calculada en el punto máximo de la curva, $L(\pi/a, \pi/a)$ esto es:

$$(3.8b) \quad \omega_{\max} = 2\sqrt{2a/m}$$

Hay un punto interesante que ya también hemos comentado en el caso anterior, y es lo que sucede con los modos normales de vibración en los bordes de la 1a. zona de Brillouin. Para el punto L donde se tiene la frecuencia máxima, la solución (3.4) es:

$$(3.9) \quad u_{\ell, m} = u(0) e^{+imn + i\ell\pi - i\omega t} = u(-1) e^{(\ell-m)\omega t},$$

precisamente la expresión para una onda estacionaria, es decir; la onda no se propaga en la red sino que se establece una onda estacionaria. Al igual que en el caso de una dimensión, éste modo corresponde a las masas más próximas vibrando en oposición de fase, pero los modos en X y Y siempre están desacoplados. /

Es decir, este modo de vibración caracterizado por $k=\pi/a$ satisface la ley de Bragg,

$$(3.10) \quad 2d \sin k = n\lambda \quad \text{para } n \text{ entero,}$$

donde d es igual a la distancia a entre las masas.

Por lo tanto,

$$(3.11) \quad \lambda = 2a \quad \text{para } n=1,$$

lo cual significa que la longitud de onda es el doble de la distancia entre las masas, para este particular modo de vibración.

Podemos confirmar el resultado (3.9), si calculamos la velocidad de grupo en los bordes de la zona de Brillouin.

En óptica, la velocidad de grupo se define,

$$(3.12) \quad \bar{v}_g = \text{grad}_{\vec{k}} \omega(\vec{k}) \quad ,$$

que en este caso, por la relación (3.8a) es:

$$(3.13) \quad \bar{v}_g = \frac{a \operatorname{sen} k_x i + a \operatorname{sen} k_y j}{(2 - \cos k_x a - \cos k_y a)^{1/2}} \quad ;$$

en los puntos L, X de la primera zona de Brillouin, resulta que:

$$(3.14) \quad \bar{v}_g = 0_{L, X}$$

y por lo tanto, la velocidad de propagación de la energía en la red es también cero, confirmamos entonces que se tiene una onda estacionaria en los puntos L, X de la primera zona de Brillouin.

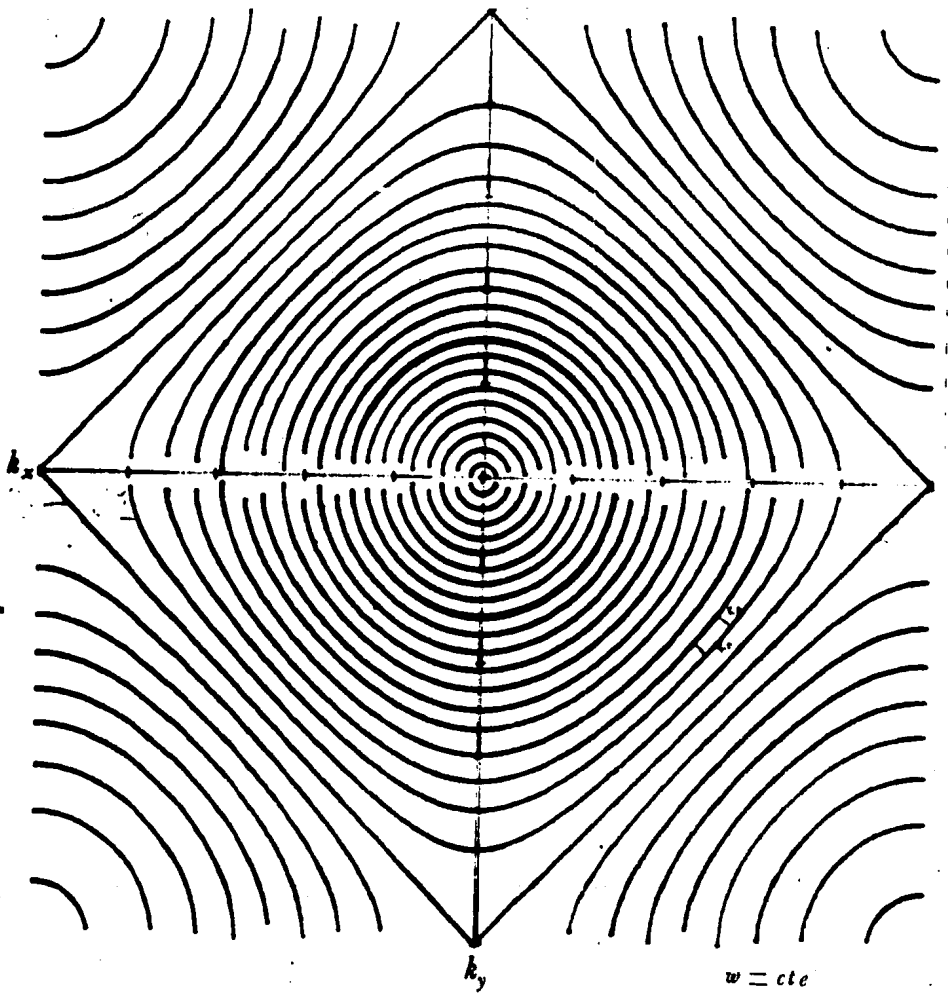


Fig. 3.4 Superficies Isoenergéticas para una red cuadrada.

La fig. 3.4 representa las curvas de $\bar{\epsilon}(k_x, k_y)$ para ω constante. Cada curva corresponde a un valor de ω constante. El cuadrado separa la primera zona de Brillouin de la segunda para la red cuadrada. Como se puede apreciar en el centro de la zona y cerca de los ángulos del cuadrado las curvas isoenergéticas son circunferencias que se deforman a medida que se alejan de estos puntos.

3.2 - CÁLCULO DE LA DENSIDAD DE ESTADOS PARA LA RED CUADRADA, -

Definimos en el capítulo uno a la densidad de estados, como el número de estados que hay en un intervalo de frecuencia ω y $d\omega$. También hemos demostrado que cada estado, está diferenciado por un vector de onda \vec{k} . Existen muchos estados para una misma frecuencia $\omega_{|\vec{k}|}$, porque \vec{k} es un vector (k_x, k_y) y ω sólo depende de las componentes en forma independiente. Por lo tanto, el número total de estados es proporcional al área de la primera zona de Brillouin, es decir, a $(2\pi/a)^2$ y el número total de estados entre ω y $\omega+d\omega$ es proporcional al área encerrada entre estas dos curvas de ω constante muy próximas. En la fig. 3.4 presentamos, una gráfica con curvas de ω -constante, en la primera zona de Brillouin.

Entonces por lo que hemos dicho:

$$(3.15) \quad \rho(\omega) d\omega = \left(\frac{a}{2\pi}\right)^2 \int d^2\vec{k}$$

donde el elemento de área entre dos curvas energéticas muy próximas es:

$$(3.16) \quad d^2\vec{k} = dk_{11} dk_1$$

pero el gradiente de ω , es perpendicular a las curvas de ω -constante, por tanto:

$$(3.17) \quad \left| \frac{\nabla_{\vec{k}} \omega}{\vec{k}} \right| dk_1 = d\omega$$

entonces, la ecuación para la densidad de estados (3.15) es:

$$(3.18) \quad \rho(\omega) = \left(\frac{a}{2\pi}\right)^2 \int dk_{11} \frac{d\omega}{\bar{v}_g \bar{k} \omega} = \left(\frac{a^2}{4\pi}\right) \int \frac{d\bar{k}}{2B \bar{v}_g}$$

donde \bar{v}_g es la velocidad de grupo tal como la definimos en (3.12). Esta integral se extiende sobre todas las curvas de ω -constante en la primera zona de Brillouin del espacio k . Sin embargo, la expresión (3.18) no resulta muy útil, debido a que no es fácil encontrar una expresión cerrada para los elementos de línea $d(k_\omega)$ para ω constante; además ésta integral está ligada al concepto de zona de Brillouin que es una consecuencia de la periodicidad y que pierde sentido para sistemas no periódicos. Utilizaremos un método más general para contar estados, que ya fue usado para la cadena lineal infinita; el de las funciones de Green, definidas en el apéndice 1.

Demostramos en el capítulo anterior que la densidad de estados en términos de la función de Green se escribe:

$$(3.19) \quad \rho(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im Tr} G .$$

El cálculo para la red cuadrada en términos de las funciones de Green se deriva en el Apéndice (A2). La función de Green relevante viene dada a nuestro problema por la ecuación (1.18) como:

$$(3.20) \quad G_{jj}(\bar{k}, k', \omega) = \frac{\delta_{jj} \delta(\bar{k} - \bar{k}')}{\omega^2 - \omega_k^2} ,$$

donde ω_k es la relación de dispersión que obtuvimos antes y viene dada según la ecuación (3.8a) que comprobamos en este mismo apéndice en la ecuación (A2.20).

Por lo tanto, el número de estados entre ω y $d\omega+d\omega$ es:

$$(3.21) \quad \rho(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} \int_{ZB} \text{Im} G_{jj}(k) d^2k =$$

$$= -\frac{2\omega M}{\pi} \int_{ZB} \text{Im} \left[\frac{1}{M\omega^2 - 2\alpha[2 - \cos k_x - \cos k_y]} \right] d^2k$$

La ecuación (3.21) nos proporciona la densidad de estados para la red cuadrada. Hemos realizado un cálculo numérico con el fin de evaluarla. La integral se debe realizar sobre la primera zona de Brillouin; por tanto consideramos nuevamente la figura 3.2 que representa dicha zona.

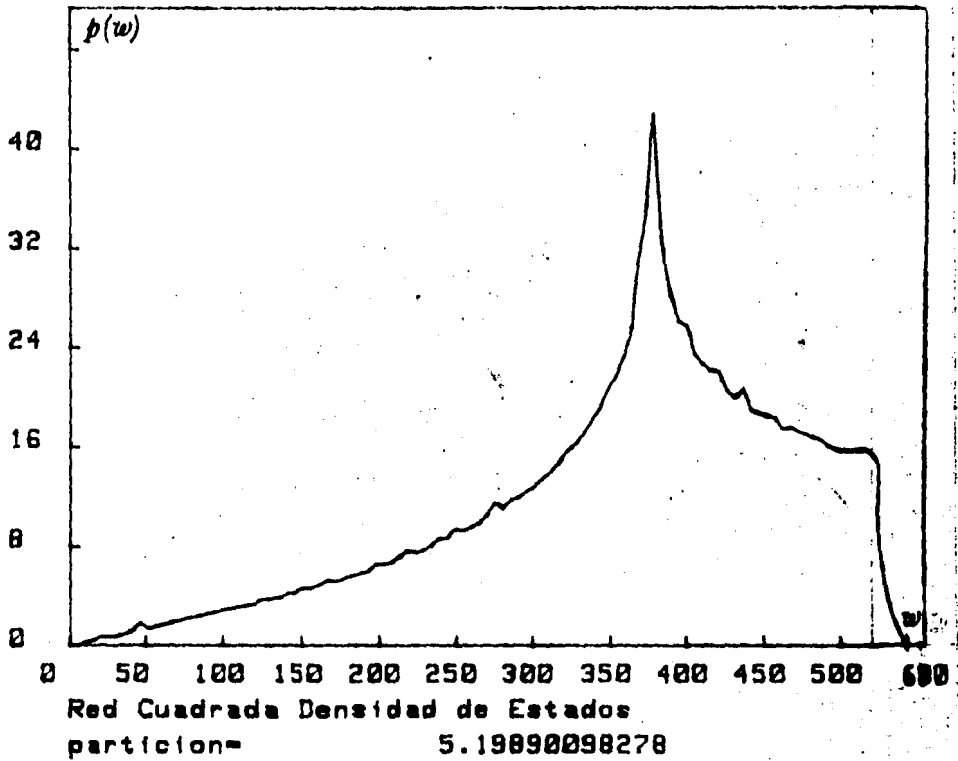


Fig. 3.5 Densidad de estados para la red cuadrada.

En vista de la simetría que presenta esta región, es suficiente fijarnos en el triángulo R que se distingue en la misma figura. Esta porción constituye la octava parte exactamente del área total de la primera zona de Brillouin. En consecuencia, nuestros resultados los multiplicamos por ocho, pero tomando en cuenta las siguientes correcciones en los pesos de los diferentes puntos del triángulo R:

a) Para los puntos situados en el interior del triángulo un peso igual a uno, ya que los tomamos una sola vez.

b) Los situados sobre la hipotenusa del triángulo y sobre los ejes k_x , k_y les asignamos la mitad del peso, puesto que en estas líneas frontera, dichos puntos se han tomado doblemente.

c) Para el punto central (origen) un octavo del peso.

El programa que ejecuta dicho cálculo con esta lógica, se realizó en forma general para cualquier red rectangular donde se incluye la red cuadrada como caso particular. Este programa se muestra en el apéndice 4. La figura 3.5 representa el espectro fonónico obtenido. Este espectro presenta un pico, que corresponde a la frecuencia máxima que sirve de punto de comparación con las redes rectangulares como lo vemos en el siguiente capítulo. Además, para frecuencias pequeñas $\rho(\omega) \sim \omega$ en concordancia con la teoría de Debye, este hecho también se comenta ampliamente en el siguiente capítulo.

CAPITULO IV LA RED RECTANGULAR

- 4.1 Presentación del modelo.
- 4.2 Renormalización de la masa y la constante de fuerza para la red rectangular.
- 4.3 Cálculo de la relación de dispersión y densidad de estados.
- 4.4 Análisis de resultados.

4.1 - PRESENTACION DEL MODELO -

Hemos examinado detenidamente la cadena lineal y la red cuadrada ordenada. Comprobamos que el caracter simétrico de estos sistemas resulta determinante en el análisis. Es interesante ahora ocuparnos de vibraciones en sistemas no tan simétricos, donde ya vamos a introducir un tipo de desorden, tal es el caso de la red rectangular.

La red rectangular se puede imaginar como un conjunto de cadenas lineales infinitas, enlazadas entre sí cada n sitios; véase la figura 4.1, donde las cadenas se han colocado horizontales. Cada elemento entre dos enlaces consecutivos es una cadena de n masas unidas entre sí con $(n-1)$ resortes, mientras que los elementos verticales sólo constan de dos masas y un resorte. Examinamos el comportamiento de este sistema en los límites adecuados. Consideramos primero el caso $n=1$, donde el elemento horizontal queda igual al elemento vertical y por lo tanto se debe recobrar la cadena cuadrada. Además extrapolamos el caso $n=\infty$, que corresponde a la cadena lineal infinita.

Hay que hacer hincapié en que el estudio de la red rectangular es original y tiene el interés de iniciar el análisis de espectros fonónicos de algunos materiales desordenados. Por ejemplo, como comentamos en la introducción, existen polímeros que se comportan como cadenas unidimensionales unidas cada cierto número de sitios, presentando un comportamiento intermedio entre una y dos dimensiones. Sin embargo para poder simular estos materiales faltaría introducir reacción en una red rectangular pura, esto es suprimir algunos enlaces. En esta tesis solo resolvemos el caso puro, dejando extensión a trabajos futuros.

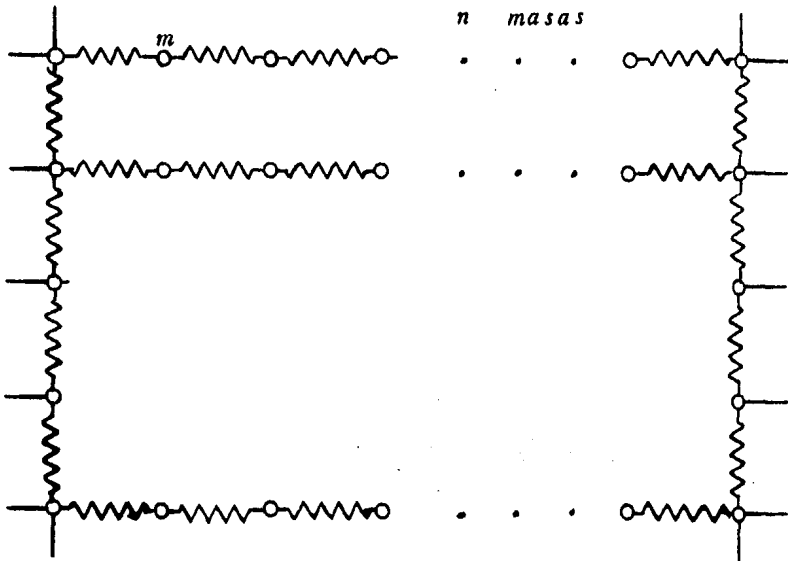


Fig. 4.1 Configuración que representa una unidad de la red rectangular con masas y resortes iguales. Cada elemento horizontal entre dos vértices de las redes es una cadena lineal ordenada de N masas. Las líneas anchas enlazan con otras unidades similares de la red infinita.

En la segunda sección de este capítulo iniciamos el estudio de este sistema, normalizamos la masa y la constante del resorte para los primeros 3 casos, ($n=1,2,3$) donde n , como ya dijimos, es el número de masas intermedias en los elementos horizontales de la red. Así en forma inductiva encontramos las relaciones de recurrencia que expresan la renormalización de la masa y de la constante de la fuerza, para el caso de n masas intermedias en términos del caso anterior. Lo que se pretende realizar es sustituir estas masas y resortes intermedios por un solo resorte y dos masas extremas, de tal manera que el sistema se puede tratar como una red cuadrada. Los nuevos elementos horizontales contienen masas y resortes ficticios, que toman en consideración los modos de vibración internos entre dos vértices horizontales y que son debido a las cadenas lineales finitas entre ellos.

Así tenemos el caso $n=1$, la fig. 4.2 que nos muestra el esquema del elemento inicial de la red con una masa intermedia y del elemento de red al que hemos llegado a realizar la renormalización.

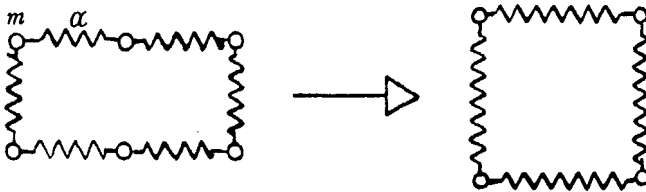


Fig. 4.2 Esquemas que muestran un elemento horizontal de la red antes y después de la renormalización para el caso $n=1$.

Para $n=2$, tenemos dos masas intermedias entre los elementos horizontales de la red. La fig. 4.3 nos presenta los elementos de red antes de la renormalización y después de ésta.

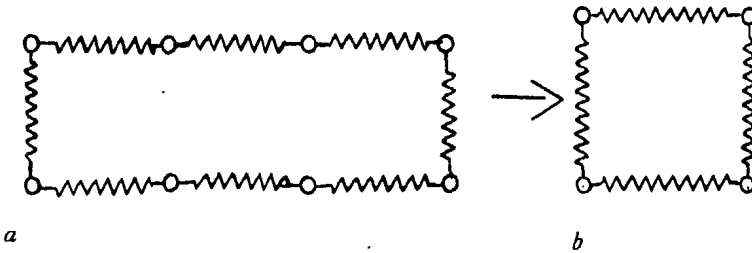


Fig. 4.3 Aquí tenemos en la figura (a), dos masas intermedias en el elemento horizontal de la red, la figura (b) nos muestra el elemento horizontal una vez realizada la renormalización.

La fig. 4.4 ilustra la transformación propuesta para el caso $n=3$.

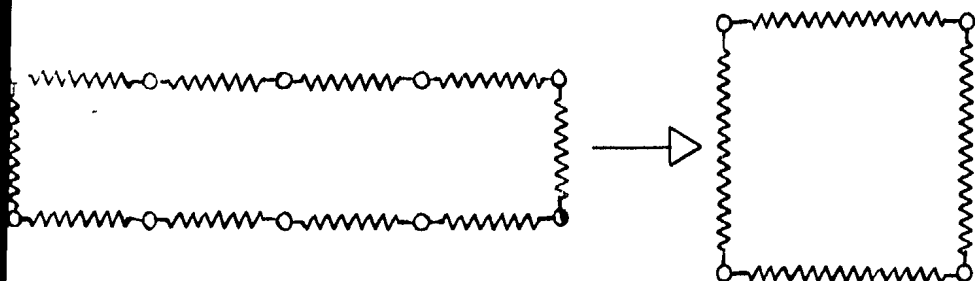


Fig. 4.4 Esquema que muestra la transformación propuesta para el caso $n=3$,

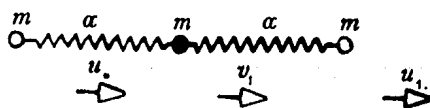


Fig. 4.5 Elemento horizontal de la red rectangular con tan sólo una masa intermedia, las masas dibujadas con círculos blancos son las que tienen uniones verticales.

En la tercera sección sustituimos estas cantidades renormalizadas en la ecuación de movimiento y obtenemos la relación de dispersión en forma análoga a como se hizo la red cuadrada.

En la última parte, nos dedicamos a estudiar la densidad de estados en general, es decir, encontramos la expresión de la densidad de estados para un número n de masas intermedias en cada elemento horizontal de la red rectangular. Realizamos el cálculo a través de un método numérico, sumando sobre la primera zona de Brillouin tal como ya se explicó en el capítulo anterior. Trazamos las curvas de la densidad de estados para los casos: $n=1$ (que equivale a la red cuadrada), $n=2, 3, 4, 5, 10$ y 50 ; e incluimos una discusión sobre estos espectros.

Finalmente, en el apéndice 3, presentamos un análisis del comportamiento de la red rectangular para un número infinito de masas intermedias ($n \rightarrow \infty$) donde los resultados coinciden con aquellos obtenidos para la cadena lineal infinita.

4.2 - RENORMALIZACION DE LA MASA Y LA CONSTANTE DE FUERZA PARA LA RED RECTANGULAR -

En el caso de una masa intermedia en el elemento horizontal de la red, es decir para $n=1$ tenemos la siguiente ecuación de movimiento (observe la fig. 4.5):

$$(4.1a) \quad (m\omega^2 - \alpha)u_0 = -\alpha V_1$$

donde u_0 es el desplazamiento de la masa izquierda y V_1 el de la masa central.

Deseamos tener una expresión sólo en términos de los desplazamientos de las masas externas, esto es:

$$(4.1b) \quad (m\omega^2 - \alpha_d^1)u_0 = \alpha_1 u_1$$

donde u_1 es el desplazamiento de la masa colocada en el extremo derecho, α_d^1 es la corrección diagonal y α^1 es la constante efectiva del resorte entre los dos vértices horizontales de la red.

Por otro lado, para la masa intermedia,

$$(4.2) \quad m\omega^2 V_1 = \alpha(V_1 - u_0) + \alpha(V_1 - u_1)$$

o bien

$$(4.3) \quad (m\omega^2 - 2\alpha)V_1 = -\alpha(u_0 - u_1) ,$$

entonces:

$$(4.4) \quad V_1 = \frac{-\alpha(u_0 + u_1)}{m\omega^2 - 2\alpha}$$

sustituimos en (4.1a)

$$(4.5) \quad (m\omega^2 - \alpha) u_0 = \frac{\alpha^2(u_0 + u_1)}{m\omega^2 - 2\alpha}$$

6

$$(4.6) \quad \left(m\omega^2 - \alpha - \frac{\alpha^2}{m\omega^2 - 2\alpha} \right) u_0 = \frac{\alpha^2 u_1}{m\omega^2 - 2\alpha},$$

con lo cual hemos eliminado las coordenadas de la masa intermedia.

Comparamos con la expresión (4.1b) entonces podemos llamar,

$$(4.7) \quad \alpha^1 d \equiv \alpha + \frac{\alpha^2}{m\omega^2 - 2\alpha} = \frac{\alpha m\omega^2 - \alpha^2}{m\omega^2 - 2\alpha} = \alpha \left(\frac{m\omega^2 - \alpha}{m\omega^2 - 2\alpha} \right)$$

Si definimos

$$(4.8) \quad \alpha_1 = \frac{-\alpha^2}{m\omega^2 - 2\alpha}$$

finalmente una relación entre las dos cantidades es:

$$(4.9) \quad \alpha^1 d = \frac{\alpha m \omega^2}{m \omega^2 - 2\alpha} + \alpha_1$$

Para $n=2$,

la ecuación de movimiento para la masa m_0 (ver figura 4.6) es:

$$(4.10) \quad (m\omega^2 - \alpha) u_0 = -\alpha V_1,$$

para m_1

$$(4.11) \quad (m\omega^2 - 2\alpha) V_1 = -\alpha u_0 - \alpha V_2,$$

para m_2

$$(4.12) \quad (m\omega^2 - 2\alpha) V_2 = -\alpha V_1 - \alpha u_1$$

despejamos V_2 de esta última igualdad y la sustituimos en (4.11),

$$(4.13) \quad (m\omega^2 - 2\alpha) V_1 = -\alpha u_0 - \alpha \left(\frac{-\alpha V_1 - \alpha u_1}{m\omega^2 - 2\alpha} \right)$$

o bien,

$$(4.14) \quad m\omega^2 - 2\alpha - \frac{\alpha^2}{m\omega^2 - 2\alpha} = -\alpha u_0 + \frac{\alpha^2}{m\omega^2 - 2\alpha} u_1, \quad ,$$

y

$$(4.15) \quad V_1 = - \frac{\alpha u_0}{m\omega^2 - 2\alpha - \frac{\alpha^2}{m\omega^2 - 2\alpha}} + \frac{\alpha^2}{(m\omega^2 - 2\alpha) [m\omega^2 - 2\alpha - \frac{\alpha^2}{m\omega^2 - 2\alpha}] u_1}, \quad ,$$

de la relación (4.10)

$$(4.16) \quad (m\omega^2 - \alpha) u_0 = \frac{\alpha^2 u_0}{m\omega^2 - 2\alpha - \frac{\alpha^2}{m\omega^2}} - \frac{\alpha^3}{(m\omega^2 - 2\alpha) [m\omega^2 - 2\alpha - \frac{\alpha^2}{m\omega^2}] u_1}, \quad ,$$

es decir,

$$(4.17) \quad [m\omega^2 - \alpha - \frac{\alpha^2}{m\omega^2 - 2\alpha - \frac{\alpha^2}{m\omega^2}}] u_0 = - \frac{\alpha^3}{(m\omega^2 - 2\alpha) [m\omega^2 - 2\alpha - \frac{\alpha^2}{m\omega^2}] u_1}$$

al igual que como hicimos en el caso anterior, comparamos con una expresión del tipo

$$(4.18) \quad (m\omega^2 - \alpha^2 d) u_0 = -\alpha_2 u_1, \quad ,$$

lo cual implica que:

$$(4.19) \quad \alpha^2 d = \alpha + \frac{\alpha^2}{m\omega^2 - 2\alpha - \frac{\alpha^2}{m\omega^2 - 2\alpha}} = \alpha + \frac{\alpha^2}{m\omega^2 - \alpha^2 d}$$

y también

$$(4.20) \quad \alpha_2 = \frac{-\alpha \alpha_1}{m\omega^2 - 2\alpha - \frac{\alpha^2}{m\omega^2 - 2\alpha}} = \frac{\alpha \alpha_1}{m\omega^2 - \alpha^2 d^{-\alpha}}$$

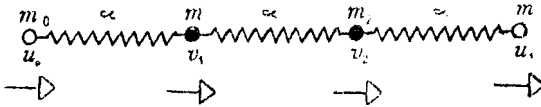


Fig. 4.6 Figura que representa el caso $n=2$

Para $n=3$

$\alpha^3 d$ y α_3 deben satisfacer ,

$$(4.21a) \quad (m\omega^2 - \alpha^3 d) u_0 = -\alpha_3 u_1$$

además tenemos las siguientes relaciones para los desplazamientos: (ver figura 4.7)

$$(4.21b) \quad (m\omega^2 - \alpha) u_0 = -\alpha v_1$$

$$(4.22) \quad (m\omega^2 - 2\alpha) V_1 = -\alpha u_0 - \alpha V_2 \quad , \quad .$$

$$(4.23) \quad (m\omega^2 - 2\alpha) V_2 = -\alpha V_1 - \alpha V_3 \quad , \quad .$$

$$(4.24) \quad (m\omega^2 - 2\alpha) V_3 = -\alpha V_2 - \alpha V_1 \quad . \quad .$$

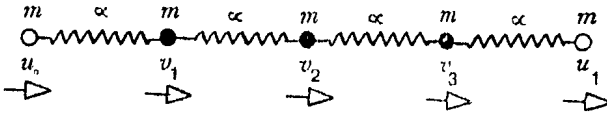


Fig. 4.7 Esquema que representa el caso de tres masas intermedias. Las masas en los círculos blancos tienen unión vertical.

De la ecuación (4.24),

$$(4.25) \quad V_3 = -\frac{\alpha}{m\omega^2 - 2\alpha} V_2 - \frac{\alpha u_1}{m\omega^2 - 2\alpha} \quad ,$$

reemplazamos este valor en (4.23),

$$(4.26) \quad (m\omega^2 - 2\alpha - \frac{\alpha^2}{m\omega^2 - 2\alpha}) V_2 = -\alpha V_1 + \frac{\alpha^2}{m\omega^2 - 2\alpha} V_2 + \frac{\alpha^2}{m\omega^2 - 2\alpha} u_1 \quad ,$$

o bien,

$$(4.27) \quad (m\omega^2 - 2\alpha - \alpha^1_d) V_2 = -\alpha V_1 - \alpha u_1,$$

sustituimos α^1_d y α_1 del caso $n=1$,

$$(4.28) \quad (m\omega^2 - \alpha - \alpha_d) V_2 = -\alpha V_1 - \alpha_1 u_1 \quad \delta$$

$$(4.29) \quad V_2 = -\frac{\alpha}{m\omega^2 - \alpha - \alpha^1_d} V_1 - \frac{\alpha_1}{m\omega^2 - \alpha - \alpha^1_d} u_1,$$

de la ecuación (4.22)

$$(4.30) \quad (m\omega^2 - 2\alpha) V_1 = -\alpha u_0 - \alpha V_2$$

$$= -\alpha u_0 - (\alpha - \alpha^2_d) V_1 - \alpha_2 u_1$$

por lo tanto

$$(4.31) \quad V_1 = -\frac{\alpha}{m\omega^2 - \alpha - \alpha^2_d} u_0 - \frac{\alpha_2}{m\omega^2 - \alpha - \alpha^2_d} u_1$$

pero de la ecuación (4.21b),

$$(4.32) \quad (m\omega^2 - \alpha - \frac{\alpha^2}{d}) u_0 = \frac{\alpha \alpha_2}{m\omega^2 - \alpha - \alpha^2 d} u_1$$

y también aquí podemos definir,

$$(4.33) \quad \alpha^3_d = \alpha + \frac{\alpha^2}{m\omega^2 - \alpha - \alpha^2 d}$$

$$(4.34) \quad \alpha_3 = \frac{-\alpha \alpha_2}{m\omega^2 - \alpha - \alpha^2 d}$$

Si comparamos estas ecuaciones con las ecuaciones (4.7), (4.8), (4.19) y (4.20) en forma general podemos entonces escribir:

$$(4.35) \quad \alpha^N_d = \alpha + \frac{\alpha^2}{m\omega^2 - \alpha - \alpha^{N-1}_d} = \alpha \left[\frac{m\omega^2 - \alpha d^{N-1}}{m\omega^2 - \alpha d^{N-1} - \alpha} \right]$$

y

$$(4.36) \quad \alpha_N = - \frac{\alpha \alpha_{N-1}}{m\omega^2 - \alpha - \alpha^{N-1}_d}$$

sustituimos este último resultado en la ecuación (4.35),

$$(4.37) \quad \alpha_d^n = \frac{\alpha_n m \omega^2}{\alpha_{n-1}} + \frac{\alpha_n \alpha_d^{n-1}}{\alpha_{n-1}} = - \frac{\alpha_n}{\alpha_{n-1}} (m \omega^2 - \alpha_d^{n-1}) .$$

Estas son las relaciones de recurrencia que nos permiten conocer las correcciones de las masas y resortes en el caso general n a partir de las correcciones para el caso $n-1$.

4.3 - CALCULO DE LA RELACION DE DISPERSION Y DENSIDAD DE ESTADOS -

Vamos a considerar el caso más simple de red rectangular, nos referimos al caso $n=1$ y definimos un sistema cartesiano, tal como lo hicimos en la red cuadrada. Nos situamos en el punto P (0,0) (obsérvese la figura 4.8a) entonces, en concordancia con la Ley de Hooke y por supuesto tomamos siempre interacciones a primeros vecinos, tenemos que la fuerza aplicada a la masa en P es:

$$(4.38) \quad m\omega^2 u_0 = \alpha_x(u_0 - V_1) + \alpha_x(u_0 - V_{-1}) + \alpha_y(u_0 - W_1) + \\ + \alpha_y(u_0 - W_{-1}) ,$$

donde u_0 es el desplazamiento de la masa en P, V_1 y V_{-1} son los desplazamientos de sus masas vecinas en la dirección X. y W_1 , W_{-1} son los valores correspondientes a aquellos en la dirección Y. Obsérvese que hemos distinguido a los resorte horizontales (α_x) de los resortes verticales (α_y) por conveniencia; aunque en el presente caso sean iguales.

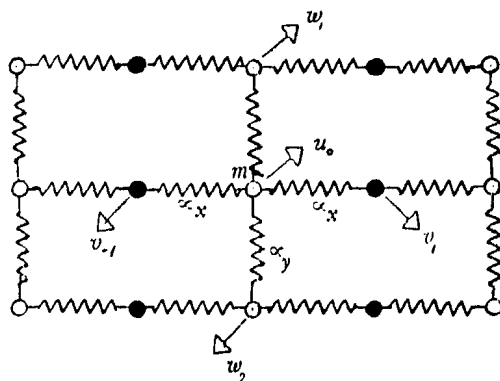


Fig. 4.8a

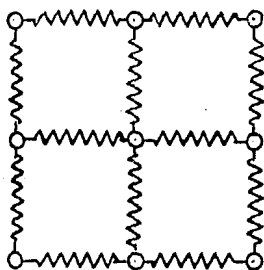


Fig. 4.8b

La figura 4.8a es una porción de la red rectangular para el caso $n=1$. La figura 4.8b representa la red a la cual se redujo al efectuar la renormalización.

Si agrupamos la ecuación (4.38) tenemos:

$$(4.39) \quad (m\omega^2 - 2\alpha_x - 2\alpha_y)u_0 = -\alpha_x(V_1 + V_{-1}) - \alpha_y(W_1 + W_{-1})$$

asimismo las ecuaciones de movimiento para las masas vecinas en la dirección x situadas en los puntos $(1,0)$ $(-1,0)$ son:

$$(4.40) \quad m\omega^2 V_1 = \alpha_x (V_1 - u_0) + \alpha_x (V_1 - u_{-1})$$

$$(4.41) \quad m\omega^2 V_{-1} = \alpha_x (V_{-1} - u_0) + \alpha_x (V_{-1} - u_{-1})$$

si sumamos estas ecuaciones obtenemos:

$$(4.42) \quad (m\omega^2 - 2\alpha_x) (V_1 + V_{-1}) = -2\alpha_x - \alpha_x (u_1 + u_{-1})$$

o bien,

$$(4.43) \quad V_1 + V_{-1} = \frac{-2\alpha_x}{m\omega^2 - 2\alpha_x} u_0 - \frac{\alpha_x}{m\omega^2 - 2\alpha_x} (u_1 + u_{-1})$$

que podemos sustituir en la ecuación (4.38) esto es:

$$(4.44) \quad \left\{ m\omega^2 - 2\alpha_y - 2\left[\alpha_x + \frac{\alpha_x}{m\omega^2 - 2\alpha_x}\right] \right\} u_0 = - \left[-\frac{\alpha_x^2}{m\omega^2 - 2\alpha_x} \right] (u_1 + u_{-1}) - \alpha_y (W_1 + W_{-1}) ,$$

pero los términos en los corchetes son precisamente los resultados que habíamos encontrado para las correcciones en las alfas α_1 α'_d según las ecuaciones (4.7) y (4.8)

por lo tanto:

$$(4.45) \quad [m\omega^2 - 2\alpha_y - 2\alpha'_d] u_0 = -\alpha_1(u_1 + u_{-1}) - \alpha_y(W_1 + W_{-1})$$

y en general para el sitio $P(\ell, m)$ se puede escribir

$$(4.46) \quad [m\omega^2 - 2\alpha_y - 2\alpha'_d] u_{\ell, m} = -\alpha_1(u_{\ell+1, m} + u_{\ell-1, m})$$

si ahora realizamos una transformada de Fourier

$$(4.47) \quad u_{\ell, m} = u_0 e^{i(\ell k_x a_x + m k_y a_y)}$$

y simplificamos, entonces:

$$(4.48) \quad [m\omega^2 - 2\alpha_y - 2\alpha'_d] = -\alpha_1 (e^{ik_x a_x} + e^{-ik_x a_x}) - \alpha_y (e^{ik_y a_y} + e^{-ik_y a_y})$$

y por la propiedad trigonométrica que ya hemos usado en (3.7b), esta última igualdad se convierte en:

$$(4.49) \quad m\omega^2 = 2[\alpha_d^1 - \alpha_1 \cos k_x a_x] + 2\alpha_y [1 - \cos k_y a_y]$$

por lo tanto la relación de dispersión para el caso general es:

$$(4.50) \quad m\omega^2 = 2[\alpha_d^n - \alpha_n \cos k_x a_x] + 2\alpha_y [1 - \cos k_y a_y] \quad .$$

Con objeto de poder calcular la densidad de estados para la red rectangular, hemos modificado la función de Green, para la red cuadrada expresada por la ecuación (3.20), de acuerdo a las correcciones que obtuvimos en la primera parte de este capítulo.

La función de Green que toma en cuenta la renormalización es ahora:

$$(4.51) \quad g(w, k) = \frac{1}{2(\alpha_d^n - \alpha_n \cos k_x a_x) - 2a(1 - \cos k_y a_y)}$$

hemos definido a la densidad de estados por:

$$(4.52) \quad \rho(w) = \int_{-\pi/a_x}^{\pi/a_x} \int_{-\pi/a_y}^{\pi/a_y} dk_x dk_y \rho(w, k)$$

donde

$$(4.53) \quad \rho(w, k) = \frac{2m\omega}{\pi} \text{Im } g(w, k)$$

por lo tanto tenemos que:

$$(4.54) \quad \rho(w, k) = \frac{2m\omega}{\pi} \int \int \text{Im} \left[\frac{dk_x dk_y}{m\omega^2 - 2(\alpha_d^n - \alpha_n \cos k_x a_x) - 2a(1 - \cos k_y a_y)} \right]$$

es la densidad de estados para la red rectangular.

Para evaluar esta densidad de estados, hemos elegido un cálculo numérico. Las constantes que usamos fueron: una masa de $m=28$ y una constante de red $a_x=.946$ que corresponden al silicio.

La región de integración es sobre toda la primera zona de Brillouin (ver figura 3.2) pero, sólo nos fue necesario sumar sobre la región triangular R (mostrada en la misma figura), ya que hemos tomado los pesos en la forma adecuada, tal como se explicó en el capítulo anterior. Los ejes k_x y k_y fueron particionados en 100 puntos cada uno de tal manera que en el triángulo R tenemos 5000 puntos.

En esencia el programa calcula en forma iterativa la función $\rho(\omega, k)$ según la fórmula (4.54), en cada punto (k_x, k_y) y para cada valor de ω ; desde ω muy pequeña ($\omega = 1.0 \times 10^{-7}$) hasta $\omega_{\max} = .55$ con un incremento de .005. Este programa contiene además una subrutina, que nos va calculando los valores de las correcciones para la masa y la constante del resorte (α_d^n y α_n), dados según las ecuaciones (4.35) y (4.36)

4.4 - ANALISIS DE RESULTADOS -

Para finalizar este capítulo exponemos las principales conclusiones obtenidas a partir de las gráficas anteriores.

La gráfica de la figura 4.9 nos presenta la curva de la densidad de estados para una red rectangular, con una masa intermedia en el elemento horizontal de la red, esto es $n=1$. Si elegimos inicialmente que el valor de la constante horizontal de la red sea el doble de la constante de red vertical, este caso se reduce al de la red cuadrada. Por lo tanto la primera curva presentada en la gráfica No. 1 nos reproduce la densidad de estados para la red cuadrada. Podemos comprobarlo si tomamos las condiciones que empleamos en el cálculo numérico para este caso:

$$\alpha'_d = \alpha, \quad \alpha_1 = \alpha, \quad \alpha_y = \alpha$$

$$a_x = a_y = a$$

y las sustituimos en la expresión general que obtuvimos para la densidad de estados de una red rectangular dada por la ecuación (4.54)

$$\rho(\omega, k) = \frac{2m\omega}{\pi} \int \int_{ZB} \text{Im} \left[\frac{dk_x dk_y}{m\omega^2 - 2(\alpha'_d - \alpha_n \cos k_x a_x) - 2\alpha(1 - \cos k_y a_y)} \right]$$

es evidente entonces que esta expresión, se reduce a la expresión de la densidad de estados para la red cuadrada.

También se observa en esta primera gráfica que la curva presenta un máximo. Este corresponde a la frecuencia máxima o frecuencia de corte ($\omega_{\max} = 520 \text{ cm}^{-1}$) para este caso, y que podemos comprobar con la relación que obtuvimos para la frecuencia máxima (ecuación 3.8b) si consideramos los valores $m=28$ y $\alpha=.946$, esto es:

$$\omega_{\max} = 2\sqrt{2 \alpha/m} = 519.89 \text{ cm}^{-1}$$

En todas las gráficas se advierte que las curvas de la densidad de estados cumplen con el modelo de Debye para ω pequeña.

Es decir: $\rho \sim \omega^2$ para dos dimensiones como es de esperarse, ya que en el modelo de Debye se basa el concepto de modo normal (movimientos independientes de las masas que forman el sistema a una misma frecuencia), que es precisamente el tratamiento que hemos seguido en este trabajo. Sin embargo, la gráfica que corresponde al caso $n=50$, es muy parecida a la densidad de estados para la cadena lineal (ver la gráfica de la figura 4.13).

En consecuencia, debemos esperar a primera vista que para $\omega=0$, $\rho \neq 0$, tal como lo asegura el modelo de Debye para una dimensión, en lugar de $\rho = 0$ para $\omega=0$, como muestra esta gráfica. Esta discrepancia se debe a que el paso de ρ igual a cero a ρ finita no es paulatino sino brusco. Esta proposición se confirma por la presencia de oscilaciones

fuertes a bajas frecuencias en esta misma curva.

En conexión al análisis de esta curva para el caso $n=50$, presentamos en el apéndice 3, un análisis del comportamiento de la red rectangular para un número infinito de masas intermedia ($n \rightarrow \infty$), donde los resultados coinciden con aquellos obtenidos para la cadena lineal infinita. En esencia se aplican las condiciones de infinitud dentro de la ecuación de movimiento.

En relación a los picos que exhiben estas curvas representadas en las figuras 4.9, 4.10, 4.11, 4.12 y 4.13, podemos inferir los siguientes resultados.

Se puede distinguir entre picos agudos y picos redondeados, los agudos se asocian con singularidades de Van-Hove¹, mientras que los redondeados corresponden a resonancias.

En todas las curvas aparece un pico de más alta frecuencia, que se desplaza hacia frecuencias menores, conforme n aumenta; así por ejemplo para $n=1$, el pico más alto se localiza en 520 cm^{-1} y para $n=10$ a 465 cm^{-1} , de tal manera que el pico superior para la red cuadrada (frecuencia máxima o frecuencia de corte) no se alcanza para $n>1$.

También se observan en todas las curvas un primer pico a bajas frecuencias que se desplaza a frecuencias todavía menores cuando n aumenta.

En total podemos apreciar que el número de picos, es igual al número de n de masas intermedias en cada elemento horizontal de la red. Esto es debido a que cada elemen-

to constituye una cadena lineal finita. Entonces cada pico representa un modo normal y en total tenemos n modos normales, tal como se demostró en el capítulo dos. Aparece sin embargo un efecto adicional la presencia de bandas en los modos normales propios de cada cadena lineal, que se producen debide a que las paredes de estas cadenas lineales son 'movibles'.

Por último debemos señalar que las colas que aparecen en todas las curvas de densidad de estados, obedecen al hecho de que los polos de la función de Green están en el eje real y se añade una pequeña parte imaginaria para poder realizar el cálculo.

Figura 4.9

Espectros fonónicos de redes rectangulares para los casos $n=1, 2, 3$; el caso $n=1$ corresponde al espectro fonónico de la red cuadrada.

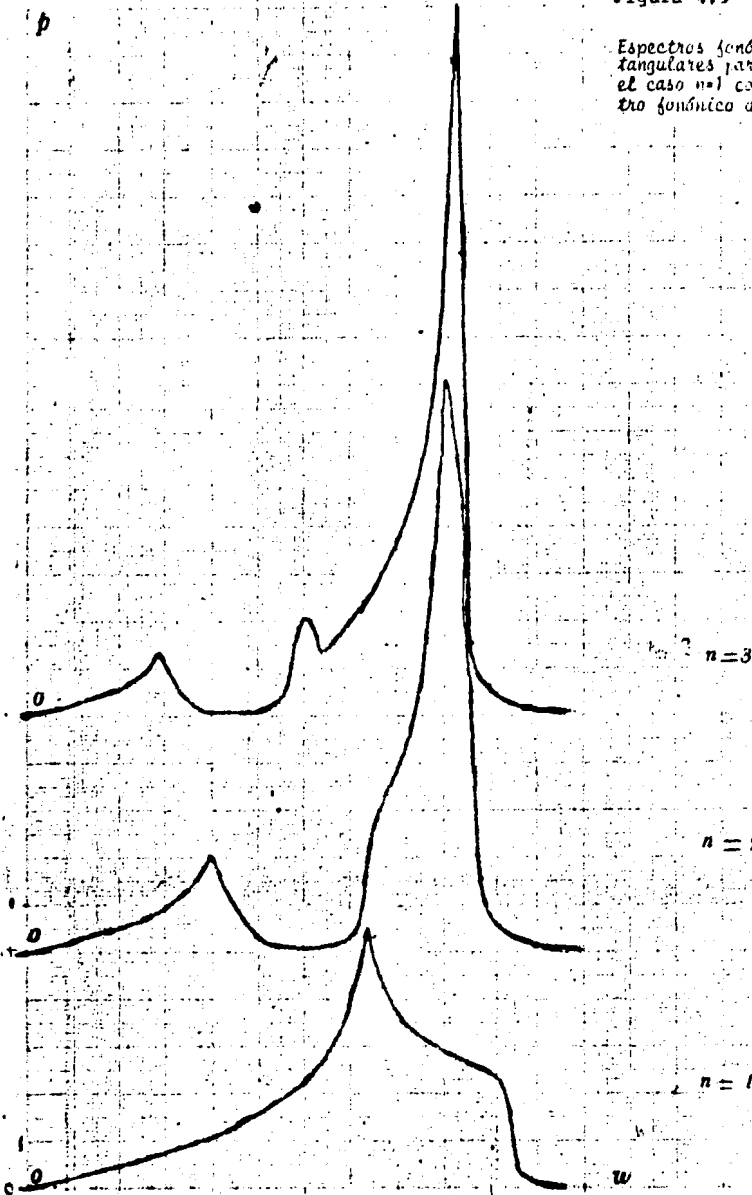


Figura 4.10

Densidad de estados para el caso de 4 masas intermedias
en el elemento horizontal de la red rectangular.

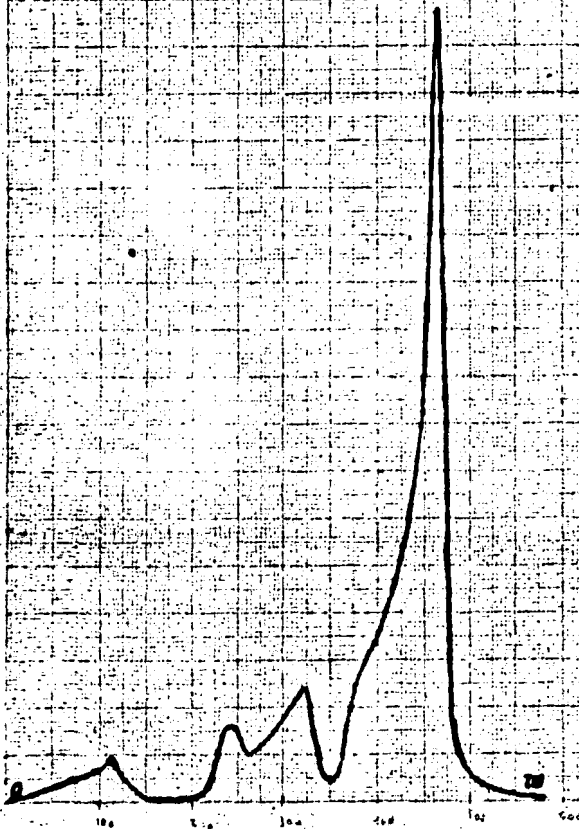


Figura 4.11

Densidad de estados para 5 masas intermedias en el elemento horizontal de la red rectangular.

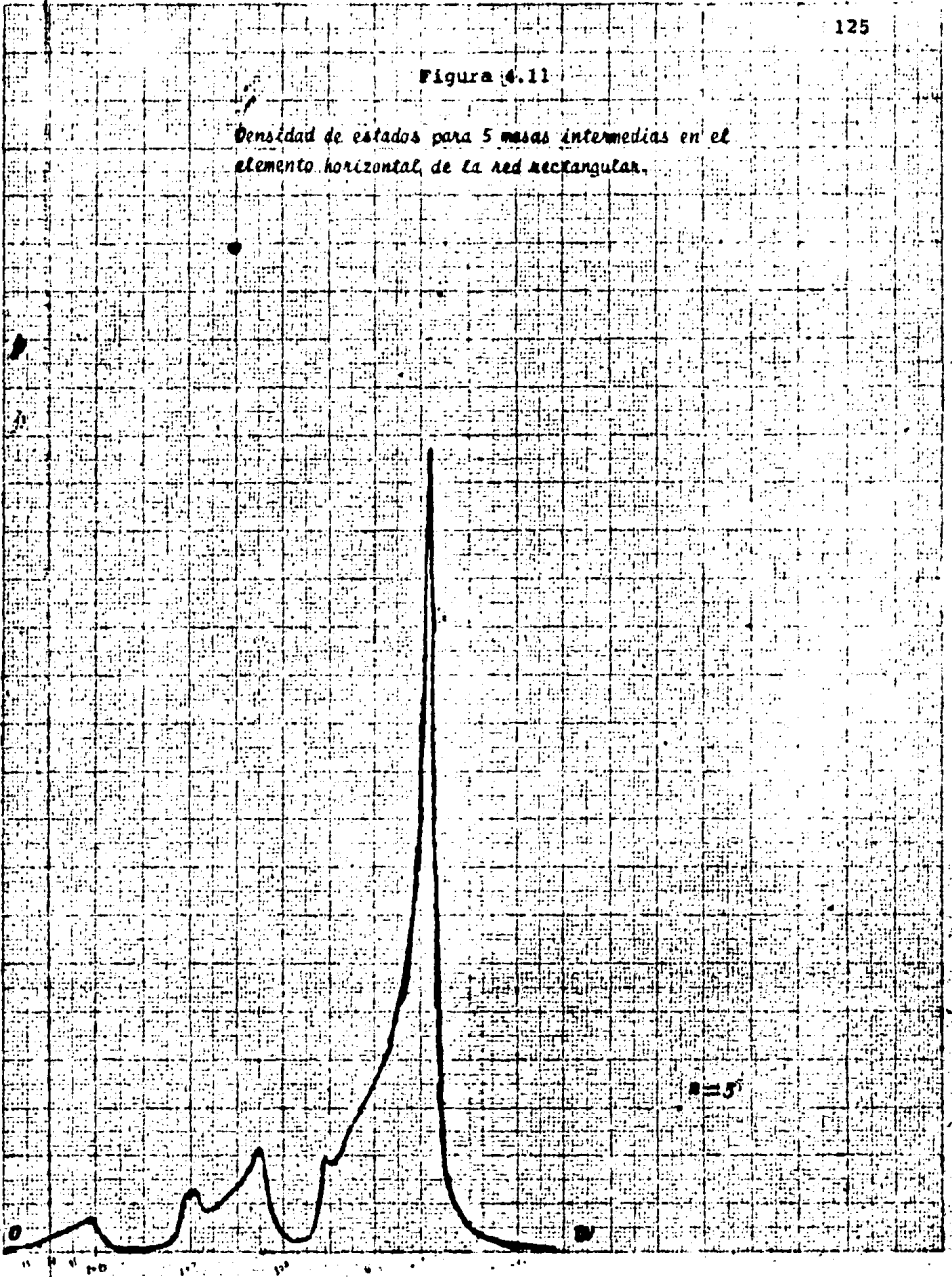


Figura 4.11

$b(\omega)$ vs. ω para el caso de 10 masas intermedias
en el elemento horizontal de la red rectangular.

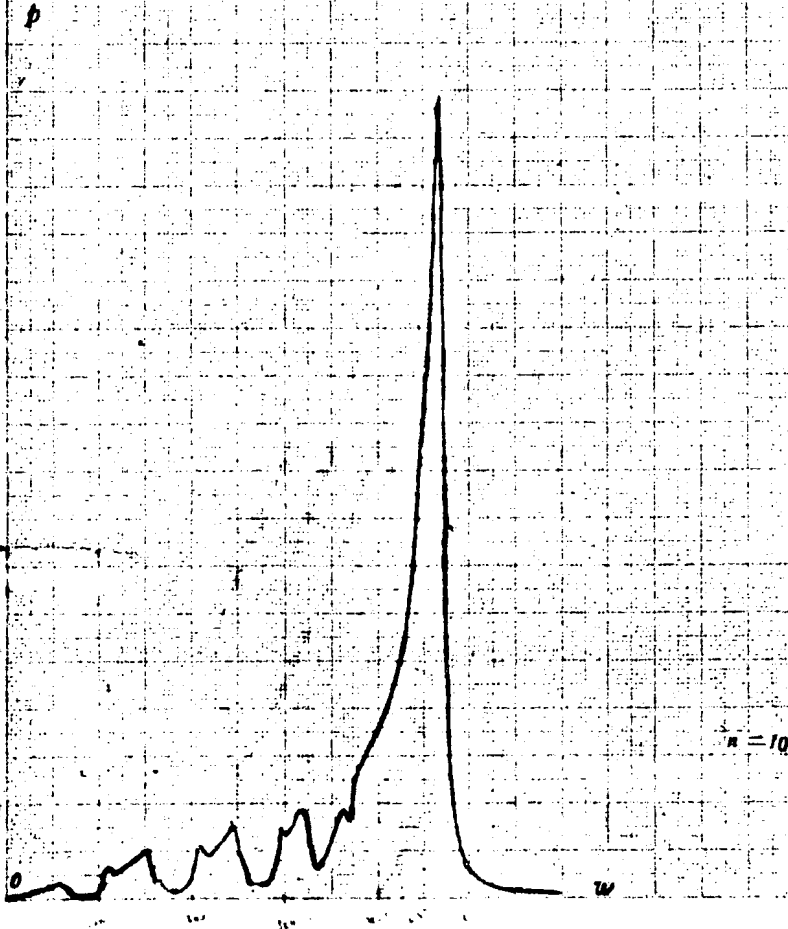
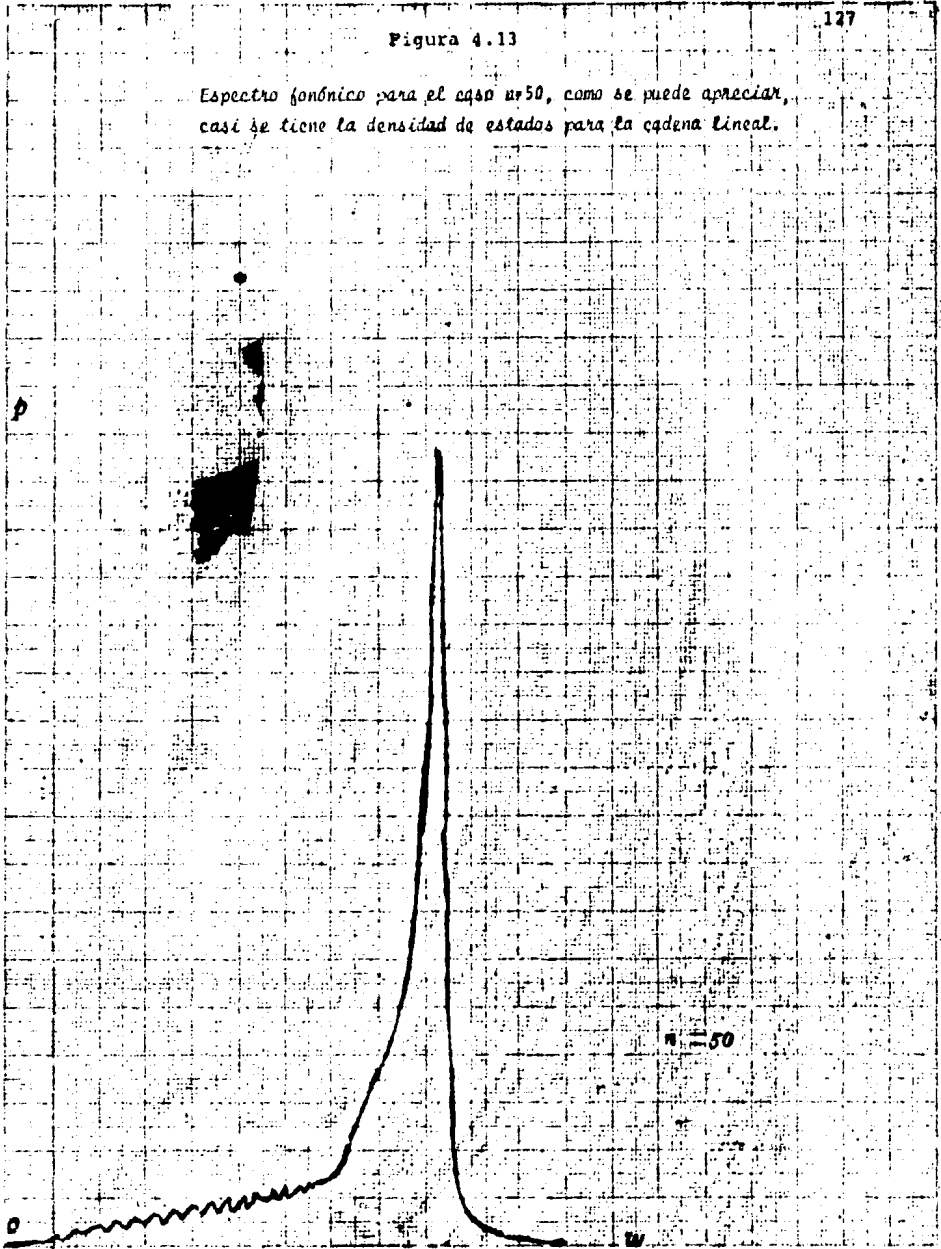


Figura 4.13

Espectro fonónico para el caso $n=50$, como se puede apreciar, casi se tiene la densidad de estados para la cadena lineal.



CONCLUSIONES

En la primera parte de este trabajo en el estudio de sistemas ordenados, en una y dos dimensiones, hemos confirmado que aprovechar su periodicidad en su tratamiento, nos proporciona una enorme simplificación. La periodicidad significa que estos sistemas poseen simetría traslacional. Esta propiedad nos permite realizar una transformación al espacio k , donde es muy cómodo y directo apreciar su comportamiento; de manera que en este espacio la nueva región de estudio es una zona muy localizada y restringida conocida como la primera zona de Brillouin. En el caso contrario nos enfrentaríamos al colosal problema de resolver un sistema finito o infinito (según el caso) de ecuaciones diferenciales acoplados, por los métodos tradicionales.

En el caso de las cadenas lineales introducimos una herramienta original para resolver la matriz secular, la de los polinomios de Tchevyshev de 1a. y 2a. tipo, que resultó muy eficaz. Otros métodos muy poderosos que incluso se usan en sistemas desordenados de muchos cuerpos son el de las funciones de Green y el de la matriz de transferencia. Aquí los hemos aplicado con éxito no solo en los casos de total simetría, como lo son la cadena lineal y la red cuadrada, sino para la red rectangular que representa un sistema de menor simetría. Encontramos una expresión en términos de las funciones de Green que podemos aplicar directamente en todos los casos para conocer la curva de la densidad de estados.

La curva de la densidad de estados para la cadena lineal exhibió un pico que corresponde a la frecuencia máxima.

La relación de dispersión para la red cuadrada es de tipo senoidal como la de la cadena lineal, sólo que refleja la simetría en las dos dimensiones. La curva de la densidad de estados en este caso exhibió dos picos. Estos resultados nos han servido de punto de comparación con las curvas de la densidad de estados para las redes rectangulares.

En la parte central de esta tesis hemos estudiado un sistema de menor simetría; la red rectangular, que constituye el primer paso en el desarrollo de un modelo teórico general. Este modelo se podrá aplicar al estudio de algunos sistemas físicos de tres dimensiones, que muestran características parecidas a sistemas teóricos de una y dos dimensiones, tal es el caso de los polímeros; en particular podemos comprobar al $(\text{CH}_2)_N^{25}$ cuyo espectro fonónico es una combinación del espectro fonónico teórico de una dimensión y el espectro fonónico de dos dimensiones.

En la red rectangular hemos aplicado una técnica de renormalización de las autoenergías en el análisis, de tal forma que la pudimos tratar como red cuadrada. Hemos encontrado las funciones de Green desplazamiento-desplazamiento promediadas termodinámicamente. Estas técnicas se requirieron para la obtención de la relación de dispersión y para la expresión de la densidad de estados. (En el caso desordenado las cadenas lineales que forman la red estarían unidas al azar, pero exigiendo que los enlaces fueran cada N veces. En este caso, tema de un estudio posterior, se aplicaría por ejemplo la técnica de Aproximación de Potencial Coherente¹⁷ (CPA) en el análisis). El cálculo de la densidad de estados y sus respectivas curvas, se realizaron para varios casos de redes rectangulares. Para redes rectangulares con cadenas lineales intermedias de 1, 2, 3, 4, 5, 10 y 50 masas. A través de un cálculo numérico, se logró conocer dichas curvas. La interpretación

y análisis de estas mostraron que:

Los espectros fonónicos cumplen con los resultados previstos en la Teoría de Debye, en el sentido de que $\rho(\omega) \propto \omega^2$ a frecuencias bajas. Sin embargo al observar la curva que corresponde al caso $n = 50$ (o masas intermedias en el elemento horizontal de la red rectangular), ya casi es el de la cadena lineal, por tal motivo, esperabamos que se comportara como la cadena lineal ($\rho \neq 0$ para $\omega = 0$), pero acusó un comportamiento de $\rho = 0$ para $\omega = 0$. Esta aparente controversia se supe^{ra} al recordar que el paso de ρ finita a $\rho = 0$ no es paulatino sino brusco. Esta aseveración se confirma al observar fluctuaciones a bajas frecuencias en este espectro. En general entonces, en este caso límite, sí se produjo lo que se esperaba, que la curva fuera casi la de la cadena lineal. Análiticamente en el análisis teórico de extrapolación cuando $n \rightarrow \infty$, los resultados también concordaron perfectamente con los de la cadena lineal. Por otro lado con respecto al otro límite ($n = 1$) los resultados coinciden exactamente con los de la red cuadrada.

Todas las curvas de la densidad de estados, en las redes rectangulares exhibieron n picos. Esto es claro, ya que los elementos horizontales de la red cuadrada, equivalen a tener cadenas lineales finitas de n masas, y puesto que cada pico está asociado a un modo normal de vibración, se confirma el hecho de que el número de modos normales para la cadena lineal es igual al número de masas móviles.

En resumen, se expone primeramente un estudio completo de las propiedades fonónicas de redes, de una y dos dimensiones. El método de cálculo es original, aunque los resultados son ya conocidos. La importancia primordial se reconoce en la segunda parte de este trabajo, donde el interés

no solo es académico, sino que se planea que constituya un primer paso para el entendimiento de espectros fonónicos experimentales de algunos materiales, tal como los polímeros. De hecho se sugiere un camino para el estudio de estos espectros, por medio de un modelo desarrollado en base a espectros fonónicos cristalinos.

A.1 - DERIVACION DE LA ECUACION GENERAL
 DE MOVIMIENTO EN TERMINOS DE LA
 FUNCION DE GREEN PARA VIBRACIONES
 EN UNA RED. -

La función de Green retardada $Gr^{11,12,13}$ se define:

$$(A1.1) \quad Gr(\ell, \ell', t, t') = \langle \langle A(\ell, t); B(\ell', t') \rangle \rangle$$

donde $t' > t$ y $A(\ell, t)$ es el operador de alguna función de propagación lineal en el sitio ℓ a un tiempo t , $B(\ell', t')$ es el operador de respuesta respectivo en el sitio ℓ' a un tiempo posterior t' .

El paréntesis interior en la expresión (A1.1) significa un valor esperado cuántico, es decir

$$(A1.2) \quad \langle A(\ell, t); B(\ell', t) \rangle = i\theta(t'-t) [A(\ell, t), B(\ell', t)]$$

aquí los corchetes se refieren al conmutador de A y B y $\theta(t-t')$ es una función escalón que vale cero cuando $t > t'$ y vale uno si $t < t'$, ésta función es introducida para tomar en cuenta el retraso en el tiempo.

Entonces (A1.1) se puede expresar:

$$(A1.3) \quad Gr(\ell, \ell', t, t') = i\theta(t'-t) \langle [A(\ell, t), B(\ell', t)] \rangle$$

el último paréntesis representa el promedio termodinámico sobre el ensamble gran canónico¹⁴.

En consecuencia, la expresión (A1.1) se puede escri

bir en forma explícita:

$$(A1.4) \quad Gr(\ell, \ell', t, t') = \frac{\text{Tr} \{ e^{-H/KT} \delta_0(t'-t) [A(\ell, t), B(\ell', t')] \}}{\text{Tr} e^{-H/KT}}$$

donde T es la constante de Boltzman, T la temperatura absoluta y H es el hamiltoniano, que en nuestro caso se puede también expresar:

$$(A1.5) \quad H = \sum_{\ell, \alpha} \frac{P_{\alpha}(\ell)^2}{2M_{\alpha}(\ell)} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \alpha', \ell, \ell'} \phi(\ell, \ell') u_{\alpha}(\ell) u_{\alpha'}(\ell')$$

aquí las α 's especifican los ejes coordenadas las ℓ 's los sitios y $\phi(\ell, \ell')$ es precisamente la matriz dinámica que habíamos nombrado D .

En particular en nuestro caso $A(\ell, t)$ y $B(\ell', t')$ son los desplazamientos es decir, la perturbación en el sitio ℓ al tiempo t genera un desplazamiento $u(\ell, t)$ y la respuesta B es un desplazamiento $u(\ell', t')$. Por lo tanto la función de Green retardada para los desplazamientos queda:

$$(A1.6) \quad Gr(\ell, \ell', t, t') = \langle\langle u(\ell, t); u(\ell', t') \rangle\rangle$$

pero de la forma del hamiltoniano en (A1.5) se observa que éste solo depende de la posición y en consecuencia, G sólo depende de $t'-t$ entonces

$$(A1.7) \quad Gr_{\alpha\alpha'}(\ell, \ell', t) = \langle\langle u_{\alpha}(\ell, t); u_{\alpha'}(\ell', 0) \rangle\rangle$$

La ecuación de movimiento de G se obtiene derivando la ecuación (A1.7) dos veces con respecto al tiempo, esto es:

$$(A1.8) \quad ih \frac{\partial G}{\partial t} = ih \frac{\partial}{\partial t} \langle \langle u_{\alpha}(\ell, t); u_{\alpha}(\ell', 0) \rangle \rangle = \\ = ih \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \frac{2\pi}{i\hbar} \theta(t) \langle [u_{\alpha}(\ell, t), u_{\alpha}(\ell', 0)] \rangle \right\}$$

pero,

$$(A1.9) \quad \theta(t) = \int_{-\infty}^t \delta(t) dt$$

donde δ es la delta de Dirac, y (A1.8) es ahora,

$$(A1.10) \quad ih \frac{\partial G}{\partial t} = 2\pi \delta(t) \langle [u_{\alpha}(\ell, t), u_{\alpha}(\ell', 0)] \rangle \\ + 2\pi \theta(t) \langle \left[\frac{\partial u_{\alpha}(\ell, t)}{\partial t}, u_{\alpha}(\ell', 0) \right] \rangle$$

recordemos las ecuaciones de Heisenberg¹⁶ de movimiento:

$$(A1.11) \quad i\hbar \frac{\partial u_{\alpha}(\ell, t)}{\partial t} = [u_{\alpha}(\ell, t), H],$$

$$(A1.12) \quad \frac{P_{\alpha}(\ell)}{M_{\alpha}(\ell)} = [u_{\alpha}(\ell, t), H],$$

si empleamos la ecuación de Heisenberg (A1.12) y en vista de que,

$$(A1.13) \quad (u_{\alpha}(\ell, t), u_{\alpha}(\ell', t')) = 0$$

la ecuación (A1.10) queda,

$$(A1.14) \quad ih \frac{\partial G}{\partial t} = 0 + ih \langle \langle [u_{\alpha}(\ell, t), H], u_{\alpha}(\ell', 0) \rangle \rangle$$

tomamos ahora la otra ecuación de movimiento de Heisenberg (A1.11) para expresar (A1.14) en la forma:

$$(A1.15) \quad i\hbar \frac{\partial G}{\partial t} = i\hbar \langle \left[\frac{P_\alpha(\ell, t)}{M_\alpha(\ell)}; u_\alpha(\ell', 0) \right] \rangle$$

que es una función de Green impulso-desplazamiento, derivamos otra vez con respecto al tiempo esto es:

$$(A1.16) \quad i\hbar \frac{\partial^2 G}{\partial t^2} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{2\pi}{i\hbar} \theta(t) \langle \left[\frac{P_\alpha(\ell, t)}{M_\alpha(\ell)}, u_\alpha(\ell', 0) \right] \rangle \right) \\ = 2\pi \delta(t) \langle \left[\frac{P_\alpha(\ell, t)}{M_\alpha(\ell)}, u_\alpha(\ell', 0) \right] \rangle + \\ + 2\pi \theta(t) \langle \left[\frac{1}{M_\alpha(\ell)} \frac{\partial P_\alpha(\ell, t)}{\partial t}, u_\alpha(\ell', 0) \right] \rangle,$$

pero debido a que:

$$(A1.17) \quad [P_\alpha(\ell, t), u(\ell', 0)] = -i\hbar \delta_{\alpha\alpha} \delta(\ell, \ell'),$$

además,

$$(A1.18) \quad [P_\alpha(\ell, t), H] = i\hbar \frac{\partial P_\alpha(\ell, t)}{\partial t},$$

la ecuación (A1.16) queda,

$$(A1.19) \quad i\hbar \frac{\partial^2 G}{\partial t^2} = -\frac{2\pi i\hbar}{M_\alpha(\ell)} \delta(t) \delta_{\alpha\alpha} \delta(\ell, \ell') + \langle \left[\frac{P_\alpha(\ell, t)}{M_\alpha(\ell)}, H \right], \\ u_\alpha(\ell', 0) \rangle$$

el conmutador de P con nuestro hamiltoniano (A1.5) cumple con:

$$(A1.20) \quad \left[\frac{P_{\alpha}(\ell, t)}{M_{\alpha}(\ell)}, H \right] = -i\hbar \phi_{\alpha\alpha}(\ell, \ell'') u_{\alpha}''(\ell'', t)$$

donde α'' y ℓ'' nos resulta al sumar y renombrar los índices.

por lo tanto:

$$(A1.21) \quad i\hbar \frac{\partial^2 G}{\partial t^2} = -\frac{2\pi i\hbar}{M_{\alpha}(\ell)} \delta(t) \delta_{\alpha\alpha} \delta_{\ell \ell'}$$

$$-i\hbar \sum_{\alpha'' \ell''} \frac{\phi_{\alpha\alpha''}(\ell, \ell'')}{M_{\alpha}(\ell)} \langle u_{\alpha}''(\ell'', t) \rangle$$

$$; u_{\alpha}(\ell, 0) \rangle \rangle ;$$

o bien,

$$(A1.22) \quad M_{\alpha}(\ell) \frac{\partial^2}{\partial t^2} G_{\alpha\alpha}(\ell, \ell', t) = -2\pi \delta(t) \delta_{\alpha\alpha} \delta_{\ell \ell'}$$

$$- \sum_{\alpha'' \ell''} \phi_{\alpha\alpha''}(\ell, \ell'') G_{\alpha''\alpha}(\ell'', \ell', t),$$

que es la ecuación de movimiento para nuestra función de Green.

Aplicamos a la función $G_{\alpha\alpha}(\ell, \ell', t)$ una transformada de Fourier al espacio ω , esto es;

$$(A1.23) \quad G_{\alpha\alpha}(\ell, \ell', t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} G_{\alpha\alpha}(\ell, \ell'; \omega) d\omega,$$

y el primer miembro en la ecuación (A1.19) queda:

$$(A1.24) \quad \frac{M_{\alpha}(t)}{2\pi} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} G_{\alpha\alpha'}(\ell, \ell'; \omega) d\omega = -\frac{M_{\alpha}(\ell)}{2\pi} \omega^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} G(\ell, \ell'; \omega) d\omega$$

además,

$$(A1.25) \quad \delta(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} d\omega$$

y entonces el segundo miembro de (A1.22) es:

$$(A1.26) \quad \delta_{\alpha\alpha'}(\ell, \ell') \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} d\omega - \frac{1}{2\pi} \sum_{\alpha''\ell''} \Phi_{\alpha\alpha''}(\ell, \ell'') \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} G_{\alpha\alpha''}(\ell'', \ell'; \omega) d\omega$$

con lo que podemos expresar la ecuación (A1.22);

$$(A1.27) \quad \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} d\omega [-M_{\alpha}(\ell) \omega^2 G_{\alpha\alpha'}(\ell, \ell'; \omega) + \delta_{\alpha\alpha'} \delta(\ell, \ell') + \sum_{\alpha''\ell''} (\ell, \ell'') G_{\alpha'\alpha''}(\ell'', \ell'; \omega)] = 0$$

pero, si la integral sobre todo el espacio de las 's es cero, ω 's es cero, la parte del integrando dentro del paréntesis es cero, en consecuencia:

$$(A1.28) \quad M_{\alpha}(\ell) \omega^2 G_{\alpha\alpha'}(\ell, \ell'; \omega) = \delta_{\alpha\alpha'} \delta(\ell, \ell') + \sum_{\alpha''\ell''} \Phi(\ell, \ell'') G_{\alpha''\alpha'}(\ell'', \ell'; \omega)$$

A 2. - DERIVACION DE $G(\bar{K})$ PARA LA RED BIDIMENSIONAL -
 - CALCULO DE LA RELACION DE DISPERSION -

En el espacio real, tenemos la siguiente ecuación de movimiento para la red.

$$(A2.1) \quad M_{\alpha}^{(\ell)} \omega G_{\alpha\alpha'}(\ell, \ell') = \delta_{\alpha\alpha'}(\ell, \ell') + \sum_{\alpha''} \sum_{\ell''} \phi(\ell, \ell'') G_{\alpha''\alpha'}(\ell'', \ell, \ell')$$

donde las α 's representa, los grados de libertad x, y ;
 y $\ell = a(m, n)$ para m, n enteros.

La ecuación (A2.1) está escrita en la representación de los desplazamientos $u_{\alpha}(\ell)$, transformándola a la representación $\psi_j(\bar{K})$:

$$(A2.2) \quad \psi_j(\bar{K}) = \left(\frac{M}{N}\right)^{1/2} \sum_{\alpha} \sum_{\ell} \sigma_j^{\alpha}(\bar{K}) e^{i\bar{K}\ell} u_{\alpha}(\ell) ;$$

donde:

N es el número total de masas y

j el número de grados de libertad por cada masa,

$\sigma_j^{\alpha}(\bar{K})$ son los coeficientes de Fourier de los modos es decir las amplitudes de cada modo (σ, \bar{K}) .

Sabemos que las ψ 's son ortonormales:

$$(A2.3) \quad \langle \psi_j(\bar{K}) | \psi_{j'}(\bar{K}') \rangle = \delta_{jj'} \delta(\bar{K} - \bar{K}') .$$

Definimos:

(A2.4)

$$G_{jj'}(K, K', \omega) = \int_{\alpha} \int_{\alpha'} \int_{\ell} \int_{\ell'} e^{i\bar{K}\ell} G_{\alpha\alpha'}(\ell, \ell', \omega) e^{-i\bar{K}'\ell'} \sigma_j^{\alpha}(\bar{K}) \sigma_{j'}^{\alpha'}(\bar{K}')$$

Multiplicamos la ecuación (A2.4) por las σ 's (los factores exponenciales correspondientes) y sumamos:

(A2.5)

$$\begin{aligned} M_{\omega}^2 \int_{\alpha} \int_{\alpha'} \int_{\ell} \int_{\ell'} e^{i\bar{K}\cdot\ell} G_{\alpha\alpha'}(\ell, \ell') e^{-i\bar{K}'\cdot\ell'} \sigma_j^{\alpha}(\bar{K}) \sigma_{j'}^{\alpha'}(\bar{K}') &= \\ &= \int_{\alpha} \int_{\alpha'} \int_{\ell} \int_{\ell'} e^{i\bar{K}\cdot\ell} \delta_{\alpha\alpha'}(\ell, \ell') e^{-i\bar{K}'\cdot\ell'} \sigma_j^{\alpha}(\bar{K}) \sigma_{j'}^{\alpha'}(\bar{K}') \\ &+ \int_{\alpha} \int_{\alpha'} \int_{\ell} \int_{\ell'} \int_{\alpha''} \int_{\alpha'''} \int_{\ell''} \int_{\ell'''} \sigma_j^{\alpha}(\bar{K}) e^{i\bar{K}\cdot\ell} \phi_{\alpha\alpha''}(\ell, \ell'') G_{\alpha''\alpha'''}(\ell'', \ell''') e^{-i\bar{K}'\cdot\ell'} \sigma_{j'}^{\alpha'}(\bar{K}') \end{aligned}$$

El primer término de la derecha en (A2.5) es:

$$(A2.6) \quad \int_{\alpha} \int_{\alpha'} \int_{\ell} \int_{\ell'} \sigma_j^{\alpha}(\bar{K}) \sigma_{j'}^{\alpha'}(\bar{K}') e^{i(\bar{K}-\bar{K}')\cdot\ell}$$

pero :

$$(A2.7) \quad \int_{\ell} e^{i(\bar{K}-\bar{K}')\cdot\ell} = N \delta(\bar{K}-\bar{K}') \text{ y en virtud de (A2.3)}$$

éste término es simplemente $M_{jj'}(\bar{K}-\bar{K}') \text{ --- (A2.8)}$

De manera que (A2.5) es:

$$(A2.8) \quad M\omega^2 G_{jj'}(\bar{R}, \bar{R}', \omega) = M\delta_{jj'}\delta(\bar{R}-\bar{R}') + R$$

Para el cálculo de R se necesita ϕ pero en este caso:

$$(A2.9) \quad \phi_{\alpha\alpha'}(\ell, \ell') = \frac{\partial^2 V_{\ell\ell'}}{\partial u_\alpha(\ell) \partial u_{\alpha'}(\ell')},$$

y si consideramos sólo fuerzas centrales a primeros vecinos en la red cuadrada de parámetro a

$$(A2.10) \quad V_{\ell\ell'} = \frac{a}{2a^2} [E_\alpha (u_\alpha(\ell) - u_\alpha(\ell')) \delta_{\ell\ell'}^\alpha]^2$$

donde $\delta_{\ell\ell'}^\alpha$ es la componente α del vector que une al vecino i con i' .

Obviamente

$$(A2.11) \quad |\delta_{\ell\ell'}^\alpha|^2 = E_\alpha (\delta_{\ell\ell'}^\alpha)^2 = a^2$$

Aplicamos (A2.9) a (A2.10) y obtenemos que:

$$(A2.12) \quad \phi_{\alpha\alpha''}(\ell, \ell'') = -\alpha \delta_{\alpha\alpha''} [\delta(\ell'' - \ell - \delta_{\ell\ell'}^\alpha) - \delta(\ell'' - \ell)];$$

de forma que R es:

(A2.13)

$$R = -\alpha \sum_{\alpha} \sum_{\alpha'} \sum_{\ell'} \sum_{\ell} \sum_{i=1}^4 \sigma_j^i(\bar{K}) e^{i\bar{K} \cdot \ell} G_{\alpha\alpha'}(\ell + \delta_i, \ell') e^{-i\bar{K}' \cdot \ell'} \sigma_j^{\alpha'}(\bar{K}') \\ + \alpha \sum_{\alpha} \sum_{\alpha'} \sum_{\ell'} \sum_{\ell} \sum_{i=1}^4 \sigma_j^{\alpha}(\bar{K}) e^{i\bar{K} \cdot \ell} G_{\alpha\alpha'}(\ell, \ell') e^{-i\bar{K}' \cdot \ell'} \sigma_j^{\alpha'}(\bar{K}')$$

(A2.14)

$$R = -\alpha \sum_{\alpha} \sum_{\alpha'} \sum_{\ell'} \sum_{\ell} \sum_{i=1}^4 \sigma_j^{\alpha}(\bar{K}) e^{i\bar{K} \cdot \ell} e^{-i[\bar{K} \cdot (\ell + \delta_i)]} e^{i\bar{K}' \cdot (\ell + \delta_i)} G_{\alpha\alpha'}(\ell, \delta_i, \ell') e^{-i\bar{K}' \cdot \ell'} \sigma_j^{\alpha'}(\bar{K}') \\ + \alpha \sum_{\alpha} \sum_{\alpha'} \sum_{\ell'} \sum_{\ell} \sum_{i=1}^4 \sigma_j^{\alpha}(\bar{K}) e^{i\bar{K} \cdot \ell} G_{\alpha\alpha'}(\ell, \ell') e^{-i\bar{K}' \cdot \ell'} \sigma_j^{\alpha'}(\bar{K}')$$

(A2.15)

$$R = -\alpha \sum_{\alpha} \sum_{\alpha'} \sum_{\ell'} \sum_{\ell} \sum_{i=1}^4 e^{-i\bar{K} \cdot \delta_i} [\sum_{\alpha} \sum_{\alpha'} \sigma_j^{\alpha}(\bar{K}) e^{i\bar{K} \cdot (\ell + \delta_i)} G_{\alpha\alpha'}(\ell + \delta_i, \ell') e^{-i\bar{K}' \cdot \ell'} \sigma_j^{\alpha'}(\bar{K}')] \\ + 4\alpha G_{jj}(\bar{K}, \bar{K}')$$

El término con el paréntesis cuadrado en (A2.15) es simplemente $G_{jj}(\bar{K}, \bar{K}')$, porque no importa el origen debido a la simetría traslacional y definimos:

$$(A2.16) \quad \partial_K = \sum_{i=1}^4 e^{-i\bar{K} \cdot \delta_i} \quad \text{de manera que (A2.6) es:}$$

$$(A2.17) \quad [M\omega^2 - 4\alpha - \alpha_K] G_{jj'}(\bar{K}, \bar{K}', \omega) = M \delta_{jj'} \delta(\bar{K} - \bar{K}')$$

finalmente:

$$(A2.18) \quad G_{jj'}(\bar{K}, \bar{K}', \omega) = \frac{\delta_{jj'} \delta(\bar{K} - \bar{K}')}{\omega^2 - \omega_K^2}$$

$$(A2.19) \quad \text{donde: } \omega_K^2 = \frac{\alpha}{M} (4 - r_K)$$

para la red cuadrada $r_K = 2 \cos k_x a + 2 \cos k_y a$ de manera que,

$$(A2.20) \quad \omega_K^2 = \frac{2\alpha}{M} (2 - \cos k_x a - \cos k_y a)$$

que es la relación de dispersión para la red bidimensional que ya obtuvimos en la ecuación (3.8a).

A 3. - EXTRAPOLACION AL INFINITO DEL NUMERO n
 DE MASAS INTERMEDIAS DE LOS ELEMENTOS
 HORIZONTALES DE LA RED RECTANGULAR. -

En este apéndice presentamos un análisis del comportamiento del sistema cuando el número n de masas intermedias entre los vértices del arreglo rectangular tiende al infinito, de tal manera que tenemos un conjunto de cadenas lineales enlazadas en sus extremos (al infinito). Debemos esperar que los resultados concuerden con los obtenidos en el capítulo dos para la cadena lineal.

En el infinito tenemos las siguientes condiciones:

$$(A3.1) \quad \alpha_d^n \approx \alpha_d^{n-1} \equiv \alpha_d \quad ,$$

es decir la corrección diagonal no depende de n para n muy grande, asimismo:

$$(A3.2) \quad \alpha_d^n \approx \alpha_{n-1} \equiv \alpha^1 \quad ,$$

recordemos la expresión para α_d^n que obtuvimos en (4.37) y tomamos la definición (A3.1)

$$(A3.3) \quad \alpha_d = \alpha + \frac{\alpha^2}{m\omega^2 - \alpha_d^{n-1}} = \alpha \left[\frac{m\omega^2 - \alpha_d^{n-1}}{m\omega^2 - \alpha_d^{n-1} - \alpha} \right] \quad ,$$

aplicamos la condición (A3.3) y se llega a la siguiente ecuación cuadrática:

$$(A3.4) \quad \alpha_d^2 - m\omega^2 \alpha_d + am\omega^2 = 0 ,$$

que resolvemos para α_d ,

$$(A3.5) \quad \alpha_d = \frac{1}{2} [m\omega^2 \pm \sqrt{(m\omega^2 - 2a)^2 - 4a^2}] ,$$

o bien por la definición (2.134),

$$(A3.6) \quad \alpha_d = \frac{1}{2} [m\omega^2 \pm a \sqrt{A^2 - 4}] .$$

Por otro lado podemos reescribir la ecuación de movimiento (4.1b) para el caso general de n masas anteriores,

$$(A3.7) \quad (m\omega^2 - \alpha_d) u_0 = -\alpha_n u_1 ,$$

consideramos ahora la matriz de transferencia T_n , que nos transporta de un sitio de la red rectangular al siguiente a través de n pasos por las masas interiores,

$$(A3.8) \quad T_n u_0 = u_1 ,$$

además, T_n también cumple con:

$$(A3.9) \quad T_n = \prod_i^n t_i$$

donde las t_i 's son las matrices de transferencia de un paso,

si sustituimos la ecuación (A3.8) en (A3.7) ésta última expresión se convierte en:

$$(A3.10) \quad (m\omega^2 - \alpha_d^n + \alpha_n T_n) u_0 = 0$$

pero $u_0 \neq 0$, por lo tanto

$$(A3.11) \quad T_n = \frac{1}{\alpha_n} (m\omega^2 - \alpha_d^n)$$

aquí, podemos usar la última igualdad del resultado (4.37) y tener:

$$(A3.12) \quad \alpha_d^n = -\alpha_n T_{n-1}$$

para luego introducir este valor de α_d^n en (A3.11)

$$(A3.13) \quad T_n = \frac{1}{\alpha_n} (m\omega^2 + \alpha_n T_{n-1})$$

cuando $n \rightarrow \infty$ la condición (A3.9) nos asegura

$$(A3.14) \quad T_n = t^n$$

ya que los extremos están muy alejados y las matrices t no dependen de i ,

dividimos entre T_n cada término en (A3.13) para obtener:

$$(A3.15) \quad 1 = \frac{1}{t} + \frac{m\omega^2}{\alpha_n T_n},$$

o bien, si usamos la relación (A3.11)

$$(A3.16) \quad 1 = \frac{1}{t} + \frac{m\omega^2}{m\omega^2 - \alpha_d^n},$$

podemos ahora reemplazar α_d^n por su valor asintótico obtenido en la relación (A3.6), entonces t es,

$$(A3.17) \quad t = - \frac{(m\omega^2/2) \pm \frac{\alpha}{2} \sqrt{A^2 - 4}}{\frac{m\omega^2}{2} \pm \frac{\alpha}{2} \sqrt{A^2 - 4}}$$

simplifiquemos esta expresión, para tener finalmente

$$(A3.18) \quad t = \frac{1}{2} (A \pm \sqrt{A^2 - 4})$$

que es precisamente la matriz de transferencia que nosotros obtuvimos para la cadena lineal infinita.

Definimos,

$$(A3.19) \quad t' = \frac{1}{2} (A \mp \sqrt{A^2 - 4})$$

lo cual implica

$$(A3.20) \quad A = t + t'$$

si reescribimos la relación (A3.8) para los desplazamientos u_{n+1} de la masa $n + 1$,

$$(A3.21) \quad u_{n+1} = t u_n$$

y si realizamos una transformada de Fourier

$$(A3.22) \quad U_n = e^{i(kna - \omega t)}$$

la relación (A3.20) nos queda:

$$(A3.23) \quad A = e^{ikw} + e^{-ikw} = 2 \cos ka$$

empleamos el valor de A según la definición (2.134) para finalmente tener:

$$(A3.24) \quad -\left(\frac{m\omega^2}{\alpha} - 2\right) = 2 \cos ka$$

o bien,

$$(A3.25) \quad m\omega^2 = 2\alpha(1 - \cos ka)$$

es decir, hemos considerado nuestras expresiones de renormalización dentro de las ecuaciones de movimiento, junto con las condiciones al infinito para la red rectangular, y logramos recuperar la expresión de la relación de dispersión para la cadena lineal que habíamos obtenido en la ecuación (2.144) del capítulo dos.

A4. LISTADO DEL PROGRAMA QUE CALCULA LA DENSIDAD
DE ESTADOS PARA REDES RECTANGULARES.

```

L
100 IMPLICIT COMPLEX (C)
200 PRINT/, 'MULTIPLO DE RED EN X???'
250 COMMON/PARAM/AY, RM, CW, N1
300 READ/, N1
400 AY=.946
500 PRINT/, 'VALOR DE WMAX???'
550 READ/, WMAX
600 DY=2.
700 DX=N1*BY
800 FI=4.*ATAN(1.)
900 RM=28.
1000
1100 PRINT/, 'PARTICION, PASO Y PARTE IMAGINARIA???'
1200 READ/, N, ST, EPSI
1300 SUM=0.
1350 SUMA1=0.0
1360 SUMA2=0.0
1400 W=0.0000001
1500 10 CONTINUE
1600 CW=CMPLX(W, EPSI)
1650 CALL CONS(CAX, CAD)
1710 SUM2=0.
1715 TSUM=0.0
1750 PESO=0.
1800 DO 20 J=1, N
1900 XK=J*PI/N/DX
2000 DO 21 I=J+1, N
2050 IF(I.GT.N)GOTO21
2100 YK=I*PI/N/DY
2200 CGY=1./((RM*CW**2-2.*(CAD-CAX*COS(XK*DX)+AY*(
2300 *1.-COS(YK*DY))))
2410 SUM2=SUM2-2.*RM*W*(AIMAG(CGY)/PI)
2450 PESO=PESO+1
2500 21 CONTINUE
2550 20 CONTINUE
2555 DO 30 I=1, N
2560 XK=I*PI/N/DX
2565 YK=XK*DX/DY
2600 CGY=1./((RM*CW**2-2.*(CAD-CAX*COS(XK*DX)+AY*(
2620 *1.-COS(YK*DY))))
2710 SUM2=SUM2-RM*W*(AIMAG(CGY)/PI)
2720 XK=0.
2800 CGY=1./((RM*CW**2-2.*(CAD-CAX*COS(XK*DX)+AY*(
2810 *1.-COS(YK*DY))))
2910 SUM2=SUM2-RM*W*(AIMAG(CGY)/PI)
2950 PESO=PESO+1
3000 30 CONTINUE
3010 PESO=PESO+1
3050 CGY=1./((RM*CW**2-2.*(CAD-CAX))
3150 RO2=(SUM2-RM*W*(AIMAG(CGY)/PI/8.))/PESO

```

```
3250 SUMA2=SUMA2+R02*ST
3255 TSUM=SUMA2*B.
3300 WRITE(6,100)W,R02,SUMA2
3400 100 FORMAT(2X,F8.5,2X,2(F8.5,2X))
3500 IF(W.GT.(WMAX+10*ST))STOP
3600 W=W+ST
3650 GO TO 10
3700 END
3800 SUBROUTINE CONS(CAX,CAD)
3900 IMPLICIT COMPLEX (C)
4000 COMMON/PARAM/AY,RM,CW,N1
4100 DIMENSION CA(800),CB(800)
4200 CA(1)=CMPLX(AY,0.)
4300 CB(1)=CA(1)
4400 DO 10 I=1,N1
4500 CA(I+1)=-AY*CA(I)/(RM*CW**2-AY-CB(I))
4600 CB(I+1)=AY+AY**2/(RM*CW**2-AY-CB(I))
4700 10 CONTINUE
4800 CAX=CA(N1)
4900 CAD=CB(N1)
4910 WRITE(6,/)CAX,CAD
4950 RETURN
5000 END
#
R
#RUNNING 8111
```

REFERENCIAS

1. Charles Kittel, "Quantum Theory of Solids", John Wiley and Sons, Inc. (1963), 179, 31.
2. George Arfken, "Mathematical methods for physicists", Academic Press, 2a. Ed. (1970), 259, 314.
3. H. Golstein, "Classical Mechanics", Addison-Wesley, 2a. Ed. (1980), 21.
4. T. Yamamoto, H. Madsuda, K. Okada, T. Takase, "The Journal of Chemical Physics", (1964) 41, 1527.
5. M. Abramowitz and Irene A. Stegun, "Handbook of Mathematical Functions", Dover Publication, (1965), 777, 178.
6. Charles Kittel, "Introducción a la física del estado sólido", 2a. ed., Reverte, (1981), 215.
7. Julia Tagüeña P., Tesis de Licenciatura, Universidad Nacional Autónoma de México.
8. E.H. Kerner, Physics Rev., (1954), 95, 687.
9. H.E. Hall, "Solid State Physics", John Wiley and Sons, (1974), 51.
10. R.J. Elliot and A.F. Gibson, "Solid State Physics", The Macmillan Press Ltd., 2a. Ed. (1976), 57.
11. D.N. Zubarev, Soviet Physics, (1960), 3, 320.

12. R.J. Elliot, J.A. Krumhansl, P.L. Leath, Reviews of Modern Physics, (1974), 3, 465.
13. R.J. Elliot, D.W. Taylor, Proc. R. Soc. London, (1967), 296, 161.
14. R.V. Churchill, "Complex Variables and Applications", 2a. Ed. McGraw-Hill Book Company (1960).
15. Kerson Huang, "Statistical Mechanics", John Wiley and Sons Inc., 3a. Ed., (1966), 159.
16. L.I. Schiff. "Quantum Mechanics", 3a. Ed., McGraw-Hill International Book Company (1981), 171.
17. Ziman, J. M., "Models of Disorder", Cambridge University Press, Cambridge (1979).