

24 - 54



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA  
DE MÉXICO**

**FACULTAD DE CIENCIAS**

**DINAMICA DE UNA RED  
CON INTERACCION A TERCEROS VECINOS**

**T E S I S**

**QUE PARA OBTENER EL TITULO DE:**

**F I S I C O**

**P R E S E N T A:**

**JUAN MANUEL TERRAZAS CASTRO**

**México, D. F.**

**1987**



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.

D I N A M I C A      D E      U N A      R E D  
C O N      I N T E R A C C I O N      A      T E R C E R O S      V E C I N O S

INTRODUCCION	2
CAPITULO I. PLANTEAMIENTO Y SOLUCION DEL PROBLEMA	7
A) EL MODELO DE RED	
B) ECUACIONES DE MOVIMIENTO Y SU SOLUCION GENERAL	
C) METODO DE OPERADORES Y SOLUCION GENERAL DE LA ECUACION DE DIFERENCIAS	
CAPITULO II. REGIONES DE EXISTENCIA PARA LAS FORMAS DE LOS MODOS NORMALES DE VIBRACION	24
A) CASO $P > 0$	
B) CASO $P = 0$	
C) CASO $P < 0$	
CAPITULO III. ANALISIS CUALITATIVO DE LOS ESPECTROS DE FRECUENCIAS	61
A) VIBRACIONES SINUSOIDALES	
B) VIBRACIONES AMORTIGUADAS TIPO 1	
C) VIBRACIONES AMORTIGUADAS TIPO 2	
CAPITULO IV. REPRESENTACION GRAFICA DE ALGUNAS DE LAS VIBRACIONES	77
CONCLUSIONES	86
BIBLIOGRAFIA	87

## INTRODUCCION

El estudio de las redes comienza con Newton<sup>(1)</sup> cuando él trató de determinar teóricamente la velocidad del sonido en el aire. Para ello tuvo que suponer que la propagación del sonido en el aire es como la de una onda elástica en una red de masas puntuales. El análisis de la red lineal fue continuado en forma esporádica, por otros autores, con el fin de que el cálculo teórico se aproximara cada vez mas al resultado experimental. Estos trabajos fueron provocando poco a poco que el estudio de la red tenga interés, muchas veces, por si mismo.

En 1881 Kelvin publica un trabajo muy completo de la dinámica de una red monoatómica, en el cual los átomos interactúan únicamente con sus vecinos mas próximos. Toma como modelo de la red el ya estudiado por Baden y Powell, completando así el estudio iniciado por ellos en 1841. El análisis de la red, lo hace proponiendo como solución para las ecuaciones de movimiento de los átomos una onda tipo sinusoidal, interviniendo en ella la frecuencia así como el número de onda. La frecuencia propuesta en la solución es la frecuencia de vibración de cada uno de los átomos alrededor de su posición de equilibrio y de igual valor para todos ellos. Además, el número de onda utilizado indica la diferencia de fase en el desplazamiento de un átomo con respecto a otro. El trabajo de Kelvin tiene un gran significado, es el primero en darse cuenta de la existencia de la frecuencia de corte en este sistema. Esto quiere decir que para valores menores a esta frecuencia de corte los desplazamientos atómicos en toda la red están descritos mediante la onda sinusoidal propuesta y para valores mayores a la

frecuencia de corte el comportamiento atómico se atenúa conforme se aleja hacia los extremos del cristal. A este último caso se le asocia un número de onda complejo.

Al analizar un cristal monoatómico con interacción a primeros vecinos la mayoría de los autores<sup>[2]</sup>, han seguido los principios dados por Kelvin. La solución propuesta es tal que solo da vibraciones tipo onda sinusoidal siempre y cuando la frecuencia angular  $\omega$  y el número de onda  $k$  se relacionen mediante la expresión  $m\omega^2 = 4K \text{ Sen}^2(ka/2)$ ; en donde  $m$  es la masa de los átomos,  $K$  la constante de interacción a primeros vecinos y  $a$  es la separación de los átomos cuando están en el equilibrio. A la anterior relación se le conoce como relación de dispersión y en ella está contenida la información de que la red vibra como una onda sinusoidal solamente si los valores de la frecuencia están incluidos en el intervalo  $(0, 2\sqrt{K/m}]$ . Asimismo, todos los desplazamientos atómicos pueden ser descritos con un número de onda contenido en la primera zona de Brillouin. O sea se encuentran en el intervalo  $-\pi/a < k < \pi/a$ . Cuando  $ka \ll \pi$  se tiene  $m\omega^2 \approx Kk^2 a^2$ , en consecuencia, en el límite para longitudes de onda largas la velocidad de fase es constante,  $v_p = \omega/k = a\sqrt{K/m}$ , en este caso el medio se comporta como elástico.

El estudio de los cristales cuando incluyen imperfecciones, ha permitido que cada vez más se creen nuevas técnicas matemáticas para resolver estos problemas, que por un lado faciliten el desarrollo y por otro lado sus resultados teóricos se aproximen cada vez más al dato experimental<sup>[3]</sup>. Reciente-

mente se ha desarrollado un nuevo método<sup>[4]</sup> basado en la solución de ecuaciones de diferencias para resolver el problema de la red con interacciones a primeros vecinos. En la región de las vibraciones atenuadas un gran número de trabajos con condiciones a la frontera han sido resueltos y se reducen en el proceso matemático, en una forma muy notable<sup>[5]</sup>. Esto es así debido a que la solución obtenida usando la técnica de los operadores en las ecuaciones de diferencias nos indica que la dinámica de la red monoatómica con interacción al primer vecino se forma con tres tipos de comportamientos: uno como una onda sinusoidal en las frecuencias menores a la de corte, otro justamente asociado con la frecuencia de corte y una tercera por encima de dicha frecuencia<sup>[4]</sup>. El último comportamiento es de atenuación y no hay necesidad de considerar el número de onda como un complejo. Además, se observa en forma directa que en los modos atenuados los átomos contiguos tienen desplazamientos contrarios.

El análisis de la red monoatómica con interacciones mas lejanas al primer vecino, se ha realizado considerando interacciones a primeros y segundos vecinos. Sin embargo, para interacciones mayores no se conoce el análisis de la dinámica de la red. Hori y Asahi<sup>[6]</sup>, al aplicar la matriz de transferencia en sistemas que incluyen la interacción al segundo vecino, concluyen que esta interacción comparada con la de primeros vecinos no da una contribución muy fuerte en los desplazamientos atómicos de la red. Gaziz y Wallis<sup>[7]</sup>, así como Fukushima<sup>[8]</sup> en sus trabajos dan a conocer que la interacción al segundo vecino si tiene una contribución significativa, ya que determinan

modos de vibración al considerar imperfecciones en la red, aunque no llegan a determinar la frecuencia de dichos modos. L. Andrade<sup>[9]</sup>, utilizando el método de las ecuaciones de diferencias resuelve varios modelos de red con diferentes modelos de imperfección. Al utilizar la técnica de los operadores en redes que incluyen interacciones a primeros y segundos vecinos, las soluciones permiten una gran variedad de comportamientos. Aquí aparece por primera vez otro tipo de vibración atenuada, que no se conocía en la interacción al primer vecino y como consecuencia no se había considerado. Con la solución general, también puede verse, aun cualitativamente, la posibilidad de obtener modos que se atenuan en el cristal con frecuencias menores a las de corte.

Motivados por los resultados presentados por L. Andrade y por su método empleado, el presente trabajo se realiza para mostrar que la red monoatómica con interacción al tercer vecino también puede resolverse analíticamente. Queremos obtener las formas de la solución general, que permitan en un futuro próximo continuar el análisis pero con imperfecciones. Como es de esperarse este trabajo es un trabajo de Física-Matemática, cuyo análisis es muy extenso en el álgebra. En la interacción atómica al tercer vecino, la frecuencia de corte que surge en los extremos de la primera zona de Brillouin es diferente a la obtenida en la interacción con los primeros o segundos vecinos. Es una frecuencia mayor a aquella, la frecuencia de corte a terceros vecinos se ve alterada precisamente por la constante de interacción a terceros vecinos. También son posibles otras dos frecuencias de corte  $\omega_+$  y  $\omega_-$ , las cuales se determinan a

partir de los valores de las constantes de interacción y de la masa de los átomos.

La solución general de las ecuaciones de movimiento atómico depende principalmente de tres tipos de comportamientos, que los llamaremos: vibraciones sinusoidales, vibraciones amortiguadas tipo 1 y vibraciones amortiguadas tipo 2; las cuales también se dan en la interacción al segundo vecino, solo que las vibraciones son más complicadas, ya que es posible un mayor número de combinaciones de los tres tipos de comportamientos.

El trabajo se presenta en cuatro partes, cada una con una finalidad. En el capítulo I, se plantean las ecuaciones de movimiento de los átomos de la red monoatómica y se indica el procedimiento para obtener su solución. La técnica empleada en la obtención de la solución es la de los operadores. En el capítulo II, se analizan los diferentes comportamientos de la solución general independiente del tiempo, según las constantes físicas del problema. En el capítulo III, se muestra el espectro de frecuencias para cada uno de los tipos de vibración, y en el capítulo IV, en forma cualitativa, se muestran posibles vibraciones de la red cuando intervienen imperfecciones en ella.



## CAPITULO I. PLANTEAMIENTO Y SOLUCION DEL PROBLEMA

La dinámica de una red unidimensional con interacciones a primeros, segundos y terceros vecinos no se encuentra analizada en la literatura conocida, tal vez, por la dificultad que presenta el análisis matemático al aplicar los diferentes métodos creados en el estudio de las vibraciones. Un resumen muy completo de todos estos métodos aparece en un trabajo reciente<sup>[10]</sup>. En este capítulo se plantean y se resuelven las ecuaciones de movimiento de los átomos en una red monoatómica con interacciones a primeros, segundos y terceros vecinos. Se utiliza para ello la técnica de las ecuaciones de diferencia finita para resolver las ecuaciones de movimiento y se obtiene la solución matemática mas general de dichas ecuaciones.

Como consecuencia de la forma de las ecuaciones de movimiento éstas se pueden descomponer en dos partes, una que depende del tiempo y es una ecuación diferencial de segundo orden la cual al resolverla indica que todos los átomos de la red deben de tener la misma frecuencia de vibración y, otra que no depende del tiempo y es una ecuación de diferencias de sexto orden y homogénea con coeficientes constantes, que se puede resolver analíticamente debido a que presenta simetría en su forma. Para obtener la solución a la ecuación de diferencias de sexto orden se utiliza el método de operadores y esto nos conduce a la necesidad de resolver una ecuación algebraica de sexto grado simétrica. Y al resolver esta ecuación algebraica de sexto grado se necesita la solución de una cúbica. Esta última se resuelve usando el método de Cardán y Vita<sup>[11]</sup>.

## A) EL MODELO DE RED

Consideremos el modelo más sencillo de red unidimensional la cual se forma con masas idénticas y unidas entre sí mediante fuerzas lineales, como se muestra en la figura 1. Cuando los átomos no están excitados, se encuentran en reposo, igualmente espaciados uno del otro. Al vibrar estos átomos se mueven alrededor de su posición de equilibrio, en este caso  $X_n(t)$  representa la distancia del  $n$ -ésimo átomo, desde su posición de equilibrio.

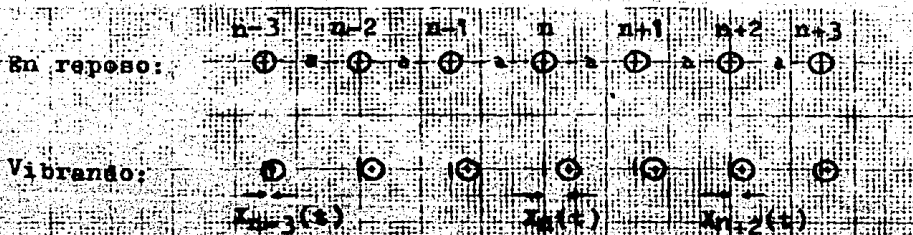


Fig 1. Geometría de la red unidimensional monoatómica.

Las fuerzas aplicadas entre las partículas tienen la propiedad de que cuando se encuentran separadas unas de otras se atraen, mientras que, si se encuentran muy próximas se repelen. Apoyándonos en esta observación, supondremos que las fuerzas entre los átomos son de restitución y las consideraremos lineales. Además, se asume que las interacciones de cualquier átomo son únicamente las que se ejercen entre él y los seis más próximos a él, de forma tal que estamos considerando únicamente la influencia directa de los átomos  $n \pm 1$ ,  $n \pm 2$  y  $n \pm 3$  sobre el átomo  $n$ , las demás son despreciables, aunque por

comportamiento del átomo  $n$ , en el sentido de que afecta a los átomos  $n + 3$ ,  $n + 2$  y  $n + 1$  en forma directa y estos a su vez afectan directamente al átomo  $n$ . En base a estas consideraciones, la fuerza neta que actúa sobre el átomo  $n$  se puede expresar en términos de la extensión de resortes unidos a los átomos  $n \pm 1$ ,  $n \pm 2$  y  $n \pm 3$ . Así la fuerza total la escribiremos como:

$$F_n = \sum_{j=1}^{j=3} K_j ( X_{n+j}(t) + X_{n-j}(t) - 2X_n(t) )$$

en donde  $K_1$ ,  $K_2$ ,  $K_3$  son las constantes de la ley de Hooke, que expresan la proporcionalidad existente entre la fuerza requerida para producir un desplazamiento atómico y el desplazamiento propiamente dicho, con sus primeros, segundos y terceros vecinos, respectivamente.

## B) ECUACIONES DE MOVIMIENTO Y SU SOLUCION GENERAL

De acuerdo con la segunda ley de Newton, esta fuerza puede expresarse como el producto de la masa  $m$  del  $n$ -ésimo átomo por su aceleración, de donde la ecuación de movimiento tiene la forma

$$m\ddot{X}_n(t) = \sum_{j=1}^{j=3} K_j ( X_{n+j}(t) + X_{n-j}(t) - 2X_n(t) ) \dots (1)$$

Debe observarse que la ecuación de movimiento de cada átomo de la red tiene la misma forma que la ecuación anterior, para todas las partículas sólo varía el valor de  $n$ .

Al resolver las ecuaciones de movimiento anteriores,

se acostumbra descomponer la expresión que nos da el desplazamiento de cada átomo, en una multiplicación de funciones, en las que una sola depende de la posición y la otra depende solamente del tiempo. Así pues, se suponen soluciones de la forma

$$X_n(t) = V(t) \cdot U_n \quad \dots (2)$$

Esta consideración, al sustituirla en las ecuaciones de movimiento y al dividirla entre  $mX_n(t)$ , hace que la igualdad sea entre dos expresiones de las cuales una solamente depende del tiempo y la otra de la posición. La única forma en que esta igualdad sea aplicable a todos los valores de las variables es que cada expresión, por separado, sea igual a una constante, denominada constante de separación. En este caso y por conveniencia se igualarán a  $-\omega^2$ . Efectuando la separación correspondiente, se obtiene:

$$\ddot{V}(t) + \omega^2 V(t) = 0 \quad \dots (3)$$

y

$$m\omega^2 U_n + \sum_{j=1}^{j=3} K_j (U_{n+j} + U_{n-j} - 2U_n) = 0 \quad \dots (4)$$

Al resolver las ecuaciones (3) y (4), se obtendrá la solución al problema de las vibraciones atómicas, basta con efectuar la multiplicación de las soluciones de ambas ecuaciones. El tratamiento matemático que se utilizará en la resolución de las ecuaciones anteriores, será el de la técnica de los operadores, tanto para la ecuación diferencial, como para la ecuación de diferencias.

El movimiento vibracional de cada átomo alrededor de su posición de equilibrio, al considerar únicamente el tiempo, se determina a partir de la ecuación (3). Esta ecuación es una ecuación diferencial homogénea de segundo orden, al resolverla mediante los operadores, se efectúa el siguiente cambio de notación:

$$\frac{d V(t)}{dt} = \hat{D} V(t) ; \quad \delta \cdot \hat{D} V(t) = \hat{D}^2 V(t)$$

con estas expresiones, la ecuación diferencial adquiere la forma

$$(\hat{D}^2 + \omega^2) V(t) = 0$$

La solución de la ecuación anterior se obtiene a partir de las raíces características del polinomio  $\hat{D}^2 + \omega^2 = 0$ . Las raíces del polinomio característico son  $\pm i\omega$ , que al ser complejas conjugadas permiten representar la solución  $V(t)$  como

$$V(t) = A \cos(\omega t + B) \quad \dots (5)$$

En (5),  $A$  y  $B$  son constantes arbitrarias. Esta solución que representa un movimiento periódico dependiente del tiempo, permite interpretar a la constante de separación como la frecuencia de vibración de cada átomo, cuyo periodo  $P$  es igual a  $2\pi/\omega$ . Si la constante de separación  $\omega$  se reemplaza por  $-\omega$ , las raíces características de la ecuación diferencial no se alteran, en consecuencia tampoco la solución. Para no repetir la información y como la frecuencia de vibración va

unida a la energía del átomo, basta con considerar como únicos valores posibles para  $w$  los reales positivos. Considerando la solución (5), se deduce que el desplazamiento del átomo  $n$  está contenido entre los valores  $AU_n$  y  $-AU_n$ , inclusive ambos, como se muestra en la figura 2.

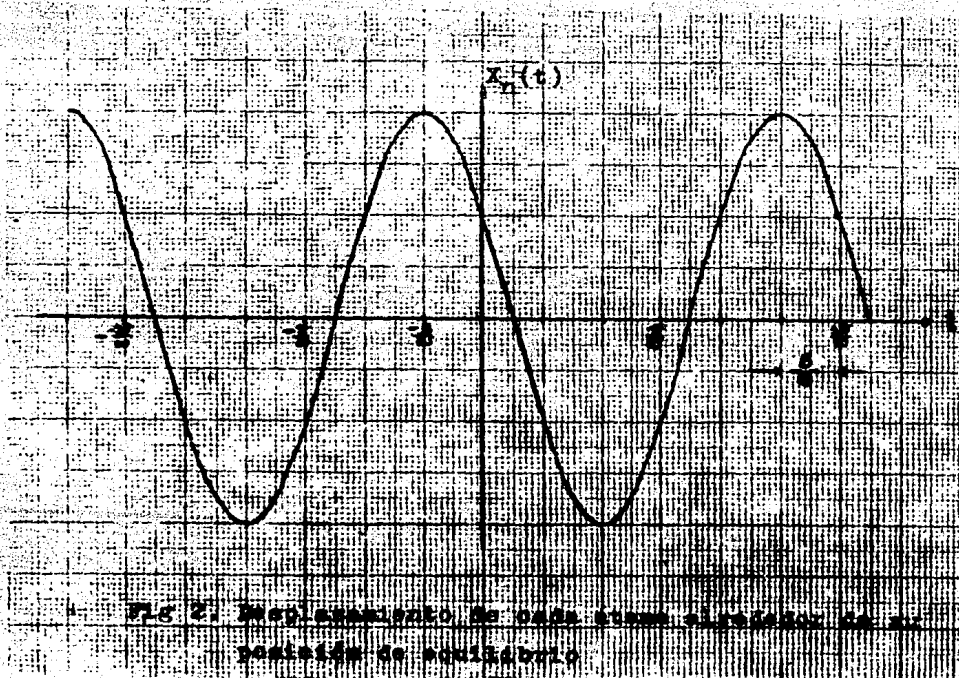


Fig. 2. Desplazamiento de cada átomo el receptor de un sistema de equilibrio.

### C) METODO DE OPERADORES Y SOLUCION GENERAL DE LA ECUACION DE DIFERENCIAS

La dinámica vibracional en una red lineal monoatómica con interacciones a primeros, segundos y terceros vecinos quedará totalmente determinada al resolver las ecuaciones de movimiento de los átomos y obtener su solución general. Ya en el caso de redes monoatómicas y diatómicas que incluyen interacciones a primeros y segundos vecinos se ha probado que vía la técnica de las ecuaciones de diferencia se pueden obtener las soluciones generales en estos sistemas. Esto es muy importante en el estudio de la dinámica de estas redes cuando se incluye imperfección local, porque al obtener los conjuntos solución generales, estos conjuntos sirven para resolver los problemas de imperfección local en ellos, como ha sido ampliamente demostrado a primeros vecinos y recientemente también en los casos en los que se incluyen segundos vecinos.

Para resolver la ecuación de diferencias finitas (4) vamos a usar el método de operadores. Aquí es necesario el operador de transferencia el cual translada la máxima amplitud de desplazamiento de un átomo en la posición  $n$  a la de la posición  $n + 1$ . Este operador satisface las siguientes propiedades [12]

$$\hat{E} u_n = u_{n+1} \quad ; \quad u_n = \hat{E}^{-1} u_{n+1} \quad . . . . (6)$$

con ayuda del operador de transferencia  $\hat{E}$  la ecuación de diferencias (4) para las máximas amplitudes de desplazamiento ató

mico adquiere la siguiente forma:

$$(K_3 E^6 + K_2 E^5 + K_1 E^4 + (mw^2 - 2K_1 - 2K_2 - 2K_3) E^3 + K_1 E^2 + K_2 E + K_3) U_n \neq 0 \quad \dots (7)$$

para integrar la ecuación (7) y obtener la solución es necesario tener la ecuación auxiliar (o característica) de ella. Esta ecuación auxiliar es la siguiente:

$$K_3 E^6 + K_2 E^5 + K_1 E^4 + (mw^2 - 2K_1 - 2K_2 - 2K_3) E^3 + K_1 E^2 + K_2 E + K_3 = 0 \quad \dots (8)$$

la cual es una ecuación algebraica de sexto grado. Aquí hacemos notar que la forma de la solución general de la ecuación de diferencias (4) depende de las raíces características de (8). En lo que sigue, en este capítulo, nos ocuparemos en obtener las raíces de la ecuación (8), la cual por cierto tiene la característica de ser simétrica. Con el propósito de obtener las raíces características de esta ecuación (8), se factoriza el polinomio característico en tres polinomios cuadráticos simétricos, cuyos coeficientes cuadráticos y los términos independientes son unitarios, ya que el coeficiente del término de sexto grado y el independiente de la ecuación característica son iguales. Se está proponiendo la descomposición de la ecuación (8) como

$$(E^2 + a_1 E + 1)(E^2 + a_2 E + 1)(E^2 + a_3 E + 1) K_3 = 0 \quad \dots (8.a)$$

lo anteriormente expresado es posible, si se cumple lo siguiente



$$K_3 ( a_1 + a_2 + a_3 ) = K_2 \quad . . . (9.a)$$

$$K_3 ( 3 + a_1 a_2 + a_2 a_3 + a_1 a_3 ) = K_1 \quad . . . (9.b)$$

$$y \quad K_3 ( 2(a_1 + a_2 + a_3) + a_1 a_2 a_3 ) = m\omega^2 - 2K_1 - 2K_2 - 2K_3 \quad . . . (9.c)$$

Los parámetros  $a_1$ ,  $a_2$  y  $a_3$  pueden determinarse, basta con resolver el sistema de ecuaciones (9). Esto se puede hacer si  $a_1$  de la primera ecuación se despeja y se sustituye en la segunda, la ecuación resultante se multiplica por  $a_3$  y se le resta la tercera, en la que ya se había reemplazado  $a_1$ . Siguiendo el procedimiento antes indicado, el parámetro  $a_3$  debe de satisfacer la siguiente ecuación

$$K_3 a_3^3 - K_2 a_3^2 + (K_1 - 3K_3) a_3 - (m\omega^2 - 2K_1 - 2K_2 - 2K_3) = 0 \quad . . (10)$$

(10) es una ecuación cúbica, esto significa que  $a_3$  toma tres valores en los complejos, para cualesquier valor asignado a las constantes físicas del problema en particular. Se puede pensar que los tres valores de  $a_3$  que satisfacen la ecuación cúbica son los correspondientes a los tres parámetros definidos como los coeficientes lineales de las ecuaciones cuadráticas (9.a), debido a que en cualquier permutación que se realice de dichos parámetros en el sistema (9), las ecuaciones no se alteran. En otras palabras, La expresión (10) tiene la misma forma si se despejan los otros dos parámetros del sistema de ecuaciones (9).

Ahora será necesario resolver primero la ecuación cúbica. La solución de esta ecuación la determinaremos siguiendo el procedimiento dado por Cardán y Vita [11], el cual consiste en hacer dos cambios de variable: uno de ellos permite eliminar

el término cuadrático, y el otro, condiciona el problema.

Primero se efectúa el cambio de variable dado por

$$3 K_3 a_3 = b + K_2 \quad \dots (11)$$

al sustituirla en la ecuación cúbica, resulta

$$b^3 + 3pq - 2q = 0 \quad \dots (12)$$

en donde

$$p = 3K_1K_3 - 9K_3^2 - K_2^2 \quad \dots (13.a)$$

y

$$\begin{aligned} 2q &= 2K_2^3 - 9K_1K_2K_3 + 27K_3^2(mw^2 - 2K_1 - 2K_2 - 2K_3) \\ &= 27mK_3^2w^2 - 3p(K_2 + 6K_3) - (K_2 + 6K_3)^3 \quad \dots (13.b) \end{aligned}$$

Como ya no interviene el término cuadrático en la ecuación cúbica, se realiza el otro cambio de variable, el cual consiste en hacer

$$b = y + z \quad \dots (14)$$

Entonces (14) transforma la ecuación (12) en la siguiente

$$y^3 + z^3 + 3(yz + p)(y + z) - 2q = 0$$

De la ecuación anterior que depende de dos variables, se pueden obtener los valores de  $y$  y de  $z$  que la satisfacen. Para lograrlo se descompone la ecuación en dos, de las cuales una implica a la otra. Como en general  $b$  no es igual a cero, se puede cambiar el problema a la resolución de las siguientes

ecuaciones

$$yz + p = 0 \quad \text{si y solo si} \quad y^3 + z^3 - 2q = 0 \quad \dots (15)$$

Tenemos que tener presente el hecho de que una se cumple si la otra se satisface; y si una no se cumple la otra tampoco. Vamos ahora a resolver este sistema, para ello se despeja de  $yz + p = 0$  a la variable  $y$ , en seguida se sustituye en la otra ecuación resultando una cuadrática para  $z^3$ . Al resolverla, se determinan dos valores que la satisfacen, los cuales al sustituirlos en la ecuación cúbica para la  $y$  y para la  $z$  se obtienen dos soluciones para  $y^3$ . Las soluciones de  $y^3$  y de  $z^3$  son las mismas solo que cuando  $y^3$  toma un valor  $z^3$  toma el otro, y viceversa. De esa manera se origina una información repetida para el valor de  $b$ , así que para evitar esto, se lo se considerarán los valores de  $y^3$  y  $z^3$  los originados por las siguientes expresiones

$$y^3 = q + \sqrt{q^2 + p^3} \quad \dots (16.a)$$

$$y \quad z^3 = q - \sqrt{q^2 + p^3} \quad \dots (16.b)$$

En (16), si una de las variables  $y$  o  $z$  es cero, forzosamente  $p = 0$ , y esto puede acarrear errores. Estos se pueden evitar si se usa la ecuación (12). En esos casos, la ecuación (12) será utilizada para obtener los tres valores de  $b$ , en consecuencia se obtendrán los tres valores de  $a_3$ . Por ahora consideraremos el caso de que tanto  $y$  como  $z$  son diferentes a cero.

Las raíces cúbicas tienen tres soluciones en los complejos, de las nueve combinaciones que resultan entre la  $y$  y la  $z$ , solo se deben considerar aquellas que satisfacen la ecuación  $yz + p = 0$ . Para poder lograr las tres combinaciones correctas, es necesario utilizar la representación compleja en su forma polar, tanto para la variable  $y$  como para la variable  $z$ . Por ello, se define

$$y^3 = r e^{i\alpha} \dots (17)$$

el argumento principal de  $y^3$  nunca es mayor de  $\pi$ , ya que la posible parte imaginaria  $\sqrt{q^2 + p^3}$  siempre es considerando la suma de la raíz cuadrada; mientras que, el argumento principal de  $z^3$  es un valor comprendido entre el 0 y  $-\pi$ , inclusive ellos, ya que ahí la parte imaginaria posible es considerando el valor negativo de la raíz cuadrada. Teniendo presente lo anterior y el hecho de que las variables  $y$  y  $z$  se relacionan, se puede determinar  $z$  en función de  $y$ , resultando

$$3K_3 a_3 = K_2 + r^{1/3} e^{i(\alpha+2\pi l)/3} - pr^{-1/3} e^{-i(\alpha+2\pi l)/3}$$

$$\text{con } l = 0, 1 \text{ y } 2 \dots (18)$$

De los tres valores de  $a_3$ , el menos uno de ellos es real, y si los otros valores son complejos estos deben ser complejos conjugados, ya que la ecuación (10) tiene todos sus coeficientes reales.

Al considerar los tres valores de  $a_3$ , que satisfacen la relación cúbica, como la solución del sistema (9), estos valores efectivamente la satisfacen. Si las soluciones de la e-

cuación cúbica se sustituyen en el sistema (9), se obtendrán seis soluciones para cada uno de los otros dos parámetros, repitiéndose las soluciones. De las tres que quedan para  $a_1$ , así como de las tres para  $a_2$ , se observará que las soluciones están repetidas. Teniendo esto presente, se considerarán únicamente los valores de los parámetros que están determinados por las siguientes expresiones

$$3K_3 a_{l+1} = K_2 + r^{1/3} e^{i(\alpha + 2\pi l)/3} - pr^{-1/3} e^{-i(\alpha + 2\pi l)/3}$$

con  $l = 0, 1, 2 \dots$  (19)

Al evaluar los parámetros cuando  $r = 0$ , a partir de las ecuaciones (19), como ya se había indicado es posible obtener una operación no permitida con  $r^{1/3}$ . Esto acontece solo cuando  $p$  se anula y  $q$  es negativo. Cuando sucede lo anterior, se obtendrán los valores de los parámetros a partir de la ecuación (12), resultando  $b^3 = 2q$  y en este caso se considerará

$$2q = r e^{i\alpha} \dots (20)$$

Aquí el argumento principal solo puede tomar dos valores, 0 ó  $6\pi$ . Aceptando la equivalencia (20), los parámetros se determinan a partir de (12) y se sustituyen en (11). De esta forma resulta que los tres valores de  $a_3$  también satisfacen el sistema de ecuaciones cuadráticas propuesto para la ecuación característica asociada al operador de traslación. Por consiguiente en el caso  $p = 0$ , solo se considerarán los valores de los parámetros determinados por las siguientes expresiones

$$3K_3 a_{1+1} = K_2 + r^{1/3} e^{i(\alpha + 2\pi l)/3} ; \quad l=0, 1, 2 \quad \dots (21)$$

Con los tres valores calculados para  $a_1$ ,  $a_2$  y  $a_3$ , se determinan las seis raíces características. Basta con resolver las ecuaciones cuadráticas propuestas asociadas al polinomio característico, aún en los casos en que los coeficientes lineales de dichas ecuaciones cuadráticas sean números complejos. Las seis raíces de la ecuación auxiliar, por lo tanto, se obtienen al resolver las ecuaciones

$$E = \frac{-a_{1+1} \pm \sqrt{a_{1+1}^2 - 4}}{2} ; \quad l=0, 1 \text{ y } 2 \quad \dots (22)$$

De la ecuación (22), se observa que cada valor de  $a_{1+1}$  origina dos raíces de la ecuación característica, las cuales, además, son inversas y podemos afirmar que:

- i) si el parámetro es complejo, las dos raíces son complejas de módulo diferente a la unidad y no son conjugadas, y
- ii) si el parámetro es real, hay dos posibilidades o son reales o son complejas conjugadas de módulo unitario.

El hecho de que el polinomio asociado a la ecuación de diferencia finita tenga sus coeficientes reales, significa que cuando una raíz del polinomio característico sea compleja también debe haber otras que sean complejas conjugadas. Otra conclusión que se puede agregar es el que nunca las seis raíces características son complejas de módulo diferente a la unidad, cuando mucho son cuatro. Lo presentado aquí hasta ahora nos

muestra como obtener las seis raíces de la ecuación auxiliar (8) en forma analítica y también nos permite escribir la solución general a la ecuación de diferencia finita (7) asociada a las amplitudes máximas de los desplazamientos atómicos. De manera que con la ayuda de las ecuaciones (2) y (5) obtenemos la solución completa al problema de los modos normales de vibración en una red monoatómica con interacciones a primeros, segundos y terceros vecinos. Ya mencionamos antes que la forma de la solución a (7) depende de las raíces características dadas por (22). En el caso de redes monoatómicas y diatómicas con interacciones a primeros y segundos vecinos esto ha sido ampliamente discutido en la literatura<sup>(7)</sup>, pero ahora nosotros vamos a seguir aquí ese tipo de discusión para obtener algunas conclusiones de la forma de las soluciones en el caso de la red monoatómica que incluye interacciones a primeros, segundos y terceros vecinos. Lo primero que debemos señalar es que la solución general a (7) tiene hasta seis constantes arbitrarias ya que esta es una ecuación de sexto grado. En lo que resta de este capítulo mostraremos los diferentes conjuntos de soluciones generales de acuerdo a las raíces características, para ello hacemos las siguientes consideraciones:

- 1) por cada raíz característica que sea real, también existe su inversa como raíz, y si éstas no se repiten determinarán en la solución general dos sumandos de la forma  $C_1 E_1^n + C_2 E_1^{-n}$ .  $C_1, C_2$  son dos constantes arbitrarias
- 2) por cada raíz característica que sea real y que se repita  $s$  veces la solución general contiene  $s$  sumandos de la forma  $(C_1 + C_2 n + \dots + C_s n^{s-1}) E^n$ , conteniendo  $s$  constantes ar--

bitrarias.

- 3) cada par de raíces complejas conjugadas no repetidas de módulo  $R$  y de amplitud  $\theta$ , contribuyen en la solución general con sumandos de la forma  $CR^n \cos(n\theta + D)$ .  $C$  y  $D$  son constantes arbitrarias,  $R$  y  $\theta$  están determinadas en términos de los parámetros del sistema.
- 4) si un par de raíces complejas conjugadas se repite  $n$  veces su combinación contiene  $2n$  constantes arbitrarias ( $C_1, C_2, \dots, C_n, D_1, D_2, \dots, D_n$ ) y es de la forma  $R^n (C_1 \cos(n\theta + D_1) + nC_2 \cos(n\theta + D_2) + \dots + n^{n-1} C_n \cos(n\theta + D_n))$ ,  $R$  y  $\theta$  están determinadas como en 3).

La solución completa se forma básicamente con tres tipos de soluciones particulares: 1)  $U_n = \cos(n\theta + D)$ , estas soluciones particulares, representan vibraciones en la red como ondas sinusoidales. De donde las vibraciones de este tipo no divergen ni se atenúan en toda la red. Son periódicas en la posición, cuya periodicidad está representada con la longitud de onda, la cual tiene el valor  $2\pi/\theta$ . El número de ondas se relaciona con la longitud de onda, por tanto también se relaciona con el argumento de la raíz característica, que es complejo de módulo unitario. 2)  $U_n = E^n$ , estas soluciones particulares son consecuencia de las raíces reales, en el siguiente capítulo se verá que son negativas, divergen hacia un solo lado de la red y por el otro se atenúan. A estas vibraciones se les llamará vibraciones amortiguadas tipo 1, cuyo módulo de atenuación o expansión de la vibración en la red está determinado con el módulo de la raíz característica. y, 3)  $U_n = R^n \cos(n\theta + D)$ , es-



tas vibraciones son consecuencia de las raíces características cuando son complejas de módulo diferente a la unidad. Originan vibraciones que también divergen en un lado del cristal y del otro se atenúan, y se conocerán como vibraciones amortiguadas tipo 2. Estas vibraciones difieren de las del tipo 1, ya que no todos los átomos ocupan la posición descrita por el decaimiento en forma de sucesión, como las del tipo 1, sino que también van en la envolvente de una onda sinusoidal.

## CAPITULO II. REGIONES DE EXISTENCIA PARA LAS FORMAS DE LOS MODOS NORMALES DE VIBRACION

En el capítulo anterior, nos ocupamos de obtener las raíces de la ecuación auxiliar a la ecuación de diferencias finitas asociada a los máximos desplazamientos atómicos en una forma analítica, porque ésto nos permite obtener las soluciones generales al problema de los modos normales de vibración en nuestro sistema. En este capítulo analizaremos con cierto detalle, cuando estas raíces son reales ó complejas, en términos de los parámetros del sistema, es decir, de las masas de los átomos y de las constantes que aparecen en las fuerzas de Hooke, las cuales producen las interacciones a primeros, segundos y terceros vecinos. Ya mencionamos antes que las raíces determinarán la forma de las soluciones generales para los modos normales de vibración y son estas formas las que nos interesa discutir ahora.

Es conocido que en la dinámica de la red para sistemas que incluyen interacciones a primeros y segundos vecinos aparecen nuevas formas de vibrar. En lo que sigue nosotros de mostraremos aquí, que la inclusión de las interacciones a terceros vecinos, también nos reproducen esas formas de vibrar que ya se encuentran en sistemas que incluyen interacción a segundos vecinos. Para analizar el comportamiento de las raíces en términos de los parámetros del sistema, es necesario estudiar cuando el parámetro  $a_{1+1}$  es real o complejo. El análisis de cuando  $a_{1+1}$  es real o complejo, se hace a partir de las

ecuaciones (19) y (21) del capítulo I y esto dependerá de cuando el valor de  $p$  (dado con la expresión (13.a)) es diferente al cero ó es igual a cero, respectivamente. Debido a lo extenso del análisis, el comportamiento de las formas de la solución completa se hará en tres partes: cuando el valor de  $p$  es mayor que cero, es cero ó cuando es menor que cero.

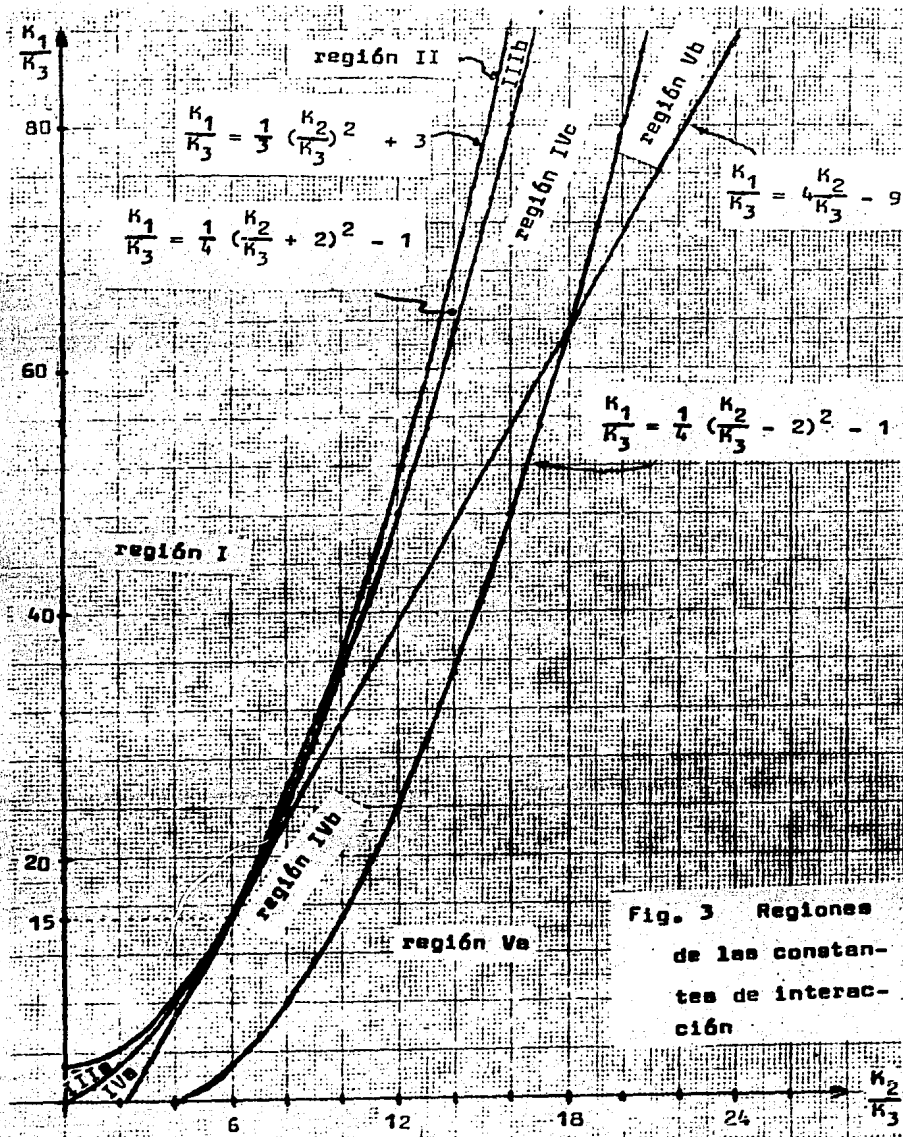
A) CASO  $p > 0$ 

Determinar las vibraciones atómicas cuando  $p$  tome los valores positivos, según la expresión (13.a) del capítulo I se logra si  $3K_1K_3 - 9K_3^2 - K_2^2$  es mayor que cero. Esto es equivalente a pedir que las constantes de interacción satisfagan la siguiente desigualdad

$$\frac{K_1}{K_3} > \frac{1}{3} \left( \frac{K_2}{K_3} \right)^2 + 3 \quad \dots (23)$$

La desigualdad (23) se puede considerar a su vez en términos de dos variables, las cuales se fijan con los cocientes que aparecen en dicha desigualdad. Con lo anterior, podemos graficar la desigualdad (23) en el primer cuadrante de un plano de coordenadas cartesianas, como se muestra en la fig. 3, la desigualdad se satisface en la región I, de esa gráfica. En el capítulo anterior vimos que para obtener las raíces características en este caso, debemos usar la ecuación (17), en ella se determina la representación compleja en su forma polar del número  $q + \sqrt{q^2 + p^3}$ . Como  $q^2 + p^3$  es positivo, ya que  $p$  lo es, se tiene que el número por transformar en la forma polar es un número real puro, con  $q^2 < q^2 + p^3$ . En consecuencia, el complejo polar equivalente al número real puro, tiene su módulo exactamente igual al número real y su argumento es cero. O sea, que tenemos las siguientes equivalencias

$$r = q + \sqrt{q^2 + p^3} \quad y \quad \alpha = 0$$



Estas al reemplazarlas en (19), nos dan los valores de los coeficientes lineales de las ecuaciones cuadráticas (8.a). Para ello obtenemos

$$3K_3 a_{1+1} = K_2 + r^{1/3} e^{2\pi i l/3} - pr^{-1/3} e^{-2\pi i l/3}; \quad l = 0, 1, 2$$

De los tres números  $a_1$ ,  $a_2$  y  $a_3$ , solo  $a_1$  es real. Esto significa que, al satisfacerse la desigualdad (23), de las raíces características cuatro son complejas de módulo no unitario y dos que podrían ser: o bien reales o bien complejas conjugadas de módulo uno. El valor de la frecuencia que separa las raíces reales de las complejas unitarias en el caso  $a_1$  real, es una de las frecuencias de corte y puede ser determinada al analizar la solución para cuando las raíces son complejas de módulo unitario como consecuencia de este parámetro. El valor del número  $a_1$  en la ecuación (22), hace que las raíces características sean complejas de módulo uno cuando se cumple  $a_1^2 - 4 < 0$ , que también podemos escribir como

$$(K_2 + r^{1/3} - pr^{-1/3})^2 < 36K_3^2$$

La desigualdad anterior no es fácil de resolver, ya que en ella intervienen dos raíces cúbicas y cada una de ellas a su vez contiene una raíz cuadrada. Para resolverla se va descomponiendo en sus equivalentes, en forma inversa a como se determinó la solución y al final queda un intervalo en términos de los parámetros físicos de la red. La desigualdad anterior se resuelve

respecto a los términos cuadráticos. Por conveniencia se analizan las dos desigualdades. Cada una de ellas se multiplica por  $r^{1/3}$ , esto no altera las desigualdades, con ello resultan las dos desigualdades en forma cuadrática para  $r^{1/3}$ . Se resuelven ambas al completar los trinomios cuadrados perfectos, en cada una de ellas. El resultado es que una de las raíces características es compleja de módulo uno cuando  $r^{1/3}$  satisface las desigualdades

$$\sqrt{p + \left(\frac{K_2 + 6K_3}{2}\right)^2} - \frac{K_2 + 6K_3}{2} < r^{1/3} < \sqrt{p + \left(\frac{K_2 - 6K_3}{2}\right)^2} - \frac{K_2 - 6K_3}{2}$$

En la expresión anterior las tres partes son positivas. Ahora se elevan al cubo y se reemplaza  $r$  por su equivalente  $q + \sqrt{q^2 + p}$ . Para simplificar la notación, se definen

$$Q_{\pm} = \sqrt{p + \left(\frac{K_2 + 6K_3}{2}\right)^2} \pm \frac{K_2 + 6K_3}{2} \quad \dots (24.a)$$

y

$$q_{\pm} = \sqrt{p + \left(\frac{K_2 - 6K_3}{2}\right)^2} \pm \frac{K_2 - 6K_3}{2} \quad \dots (24.b)$$

con lo anterior podemos escribir la desigualdad como

$$Q_{-}^3 - q < \sqrt{q^2 + p}^3 < Q_{+}^3 - q$$

El término central del intervalo siempre es positivo, lo que permite afirmar que este intervalo se satisface solo cuando  $q$  es menor que  $Q_{-}^3$ . También se observa que al ser  $q$  mayor o igual a  $Q_{+}^3$  la desigualdad de la izquierda del intervalo ante-

rior se satisface para todos los valores de  $q$ . El intervalo, por facilidad, se separa en las dos desigualdades equivalentes. Estas se resuelven por separado y al final se intersectan los conjuntos solución. Después de hacer esto tenemos  $q_-^3 - q_+^3 < 2q < q_-^3 + q_+^3$ . Al desarrollar las expresiones cúbicas y al reemplazar  $2q$  por su equivalente dado en (13.b), se obtiene el conjunto solución cuando las raíces características son complejas conjugadas de módulo unitario. Esto sucede cuando  $w$  está restringida al siguiente intervalo

$$0 < w < \sqrt{4(K_1 + K_3)/m} \quad \dots (25)$$

El término del lado derecho de la desigualdad (25) lo definimos como  $w_0$ .

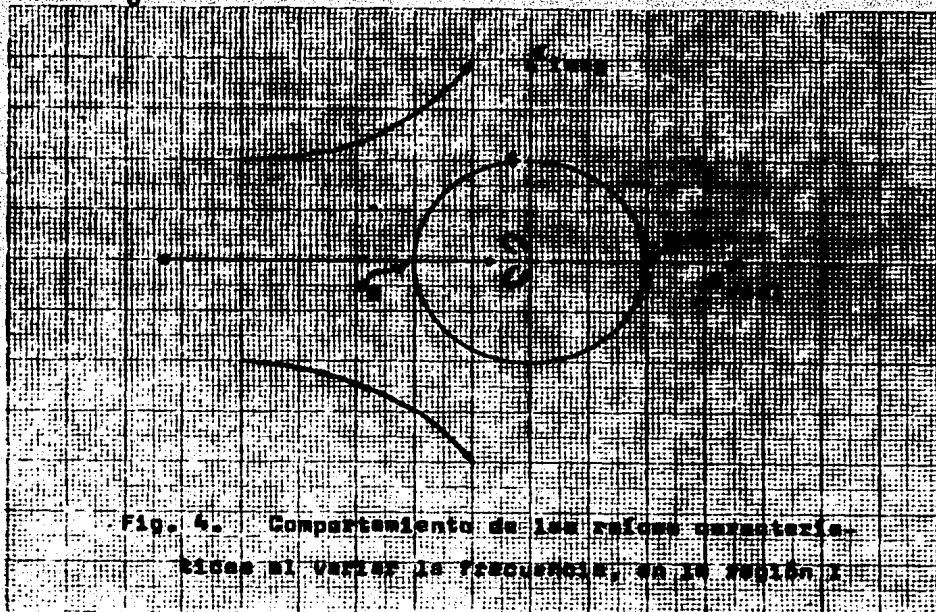


Fig. 4. Comportamiento de las raíces características al variar la frecuencia, en la región I



$\omega$ $\omega_0$ 0	dos raíces reales negativas	dos raíces complejas	dos raíces complejas
	dos raíces complejas conjugadas módulo uno	de módulo no unitario	de módulo no unitario
	$a_1$	$a_2$	$a_3$

Tabla anexa a la fig. 4, en ella se muestra el tipo de raíz característica como consecuencia de los parámetros

En la fig. 4, se grafican las seis raíces características en el plano complejo. Para dar una mayor idea del comportamiento de ellas, también se anexa una tabla como la usada para el análisis del problema que incluye interacciones a segundo vecinos [13].

En la tabla se aprecia que para todo valor de la frecuencia cuatro de las raíces de la ecuación característica son complejas de módulo no unitario, formándose dos parejas de complejas conjugadas. Además, cada raíz tiene su inversa multiplicativa y deben de satisfacer las ecuaciones (22). En la tabla y también con la gráfica, se observa que, cuando la frecuencia es cero hay dos raíces reales y de la gráfica se ve que su magnitud es la unidad. Al crecer la frecuencia en su valor, las raíces consecuencia del parámetro  $a_1$  se comportan como comple

jas conjugadas de módulo unitario hasta el valor  $\omega_0 = \sqrt{4(K_1 + K_2)}/m$ . De ahí en adelante nuevamente son reales, pero ahora son negativas. Para valores mayores a esta frecuencia una tiende a cero y la otra diverge negativamente.

Ahora vamos a escribir enseguida las formas de la solución general en el caso  $p > 0$ , que son las que corresponden en la fig. 3 a la región I. Como las amplitudes máximas de desplazamientos atómicos  $U_n$  son reales, por conveniencia, vamos a escribir las soluciones para este caso así:

i) si  $\omega = 0$ ,

$$U_n = C_1 + nD_1 + C_2 R^n \cos(n\theta_2 + D_2) + C_3 R^{-n} \cos(n\theta_2 + D_3)$$

ii) si  $0 < \omega < \omega_0$

$$U_n = C_1 \cos(n\theta_1 + D_1) + C_2 R^n \cos(n\theta_2 + D_2) + C_3 R^{-n} \cos(n\theta_2 + D_3)$$

iii) si  $\omega = \omega_0$

$$U_n = C_1 (-1)^n + nD_1 (-1)^n + C_2 R^n \cos(n\theta_2 + D_2) + C_3 R^{-n} \cos(n\theta_2 + D_3)$$

iv) si  $\omega > \omega_0$

$$U_n = C_1 E_1^n + D_1 E_1^{-n} + C_2 R^n \cos(n\theta_2 + D_2) + C_3 R^{-n} \cos(n\theta_2 + D_3)$$

. . . . (26)

En donde,  $\theta_1$  es el argumento de las raíces complejas de módulo unitario,  $R$  es el módulo de las complejas con valor menor a la unidad y  $\theta_2$  su argumento.  $E_1$  es la raíz real negativa mayor a  $-1$ .  $C_1, C_2, C_3, D_1, D_2$  y  $D_3$  son las constantes arbitrarias, ya que tenemos una ecuación de diferencias de sexto orden.

B) CASO  $p = 0$ 

En esta sección, se analizarán las formas que tienen las soluciones generales cuando las constantes de interacción entre los átomos cumplen la igualdad

$$\frac{k_1}{k_3} = \frac{1}{3} \left( \frac{k_2}{k_3} \right)^2 + 3 \quad \dots (27)$$

Esta igualdad corresponde en la fig. 3 a la región II. En este caso, al obtener las formas de las raíces características se empieza desde la consideración de que  $p = 0$ . Pero ahora los números  $a_1$ ,  $a_2$  y  $a_3$  se determinan considerando el número  $2q$  en su representación polar, según la expresión (20). Como  $2q$  no siempre es positivo, entonces se tiene que el módulo, así como el argumento, varían en su representación. Para tener un análisis completo, es más fácil hacerlo en tres partes: cuando  $q$  es negativo, cuando  $q$  es igual a cero y cuando  $q$  es positivo. Empezaremos con el caso  $q < 0$ . Al reemplazar  $p = 0$  en la expresión (13.b), esta se simplifica, y si tomamos los valores de  $q$  únicamente negativos, se está considerando solo una parte de todos los posibles valores de la frecuencia. O sea, se están considerando únicamente las frecuencias menores a

$$\omega_1 = \sqrt{(k_2 + 6k_3)^3 / (27mk_3^2)} \quad \dots (28)$$

Por supuesto hay que tener presente también, el hecho de que las frecuencias consideradas son solamente las reales no negativas. Además, cuando los valores de la frecuencia satisfacen la desigualdad  $0 < \omega < \omega_1$ , empezaremos considerando el número

ro real  $2q$  como un complejo en su forma polar. Como este número es real negativo, entonces su módulo  $r$  y su argumento  $\alpha$  están dados por las expresiones  $r = -2q$  y  $\alpha = \pi$ . Con éstos valores podemos escribir en este caso los parámetros  $a_1$ ,  $a_2$  y  $a_3$ ; basta con reemplazarlos en las ecuaciones (21). De ellas obtenemos

$$3K_3 a_{1+1} = K_2 + \sqrt[3]{-2q} e^{i(\pi+2\pi l)/3} \quad \text{con } l = 0, 1 \text{ y } 2$$

Al evaluar las anteriores relaciones para los diferentes valores de  $l$ , se obtiene que únicamente  $a_2$  es un número real. De manera que los comportamientos de las vibraciones atómicas cuando  $0 < \omega < \omega_1$ , son como las obtenidas en la anterior sección. Como se vió en el caso  $p > 0$ , es conveniente determinar los rangos en donde la solución tiene comportamientos diferentes, para poder determinar la forma de la solución, en cada uno de los rangos.

El número real  $a_2$  origina vibraciones sinusoidales cuando  $-2 < a_2 < 2$ . Como  $a_2$  se determina con el valor de  $l$  igual a 1, se tiene en este caso  $a_2 = -1$ . Utilizando esta equivalencia, el número  $a_2$  origina raíces complejas de módulo unitario cuando se satisface

$$-6K_3 < K_2 - \sqrt[3]{-2q} < 6K_3$$

Este intervalo puede analizarse sin descomponer sus dos desigualdades. Para ello, se despeja la raíz cúbica, después se eleva al cubo. Recordando los términos para despejar el nú-

mero negativo  $2q$ , resulta

$$-(K_2 + 6K_3)^3 < 2q < -(K_2 - 6K_3)^3$$

Se sabe en este caso que  $2q$  es negativo, ya que se están considerando frecuencias menores a  $\omega_1$ , de forma que la desigualdad de la derecha incluye dos posibilidades: a) cuando  $K_2 \geq 6K_3$ , la expresión de la derecha no es positiva y se debe considerar el intervalo en su totalidad; mientras que, b) si  $K_2 < 6K_3$ , la expresión es positiva, de donde la desigualdad por el lado derecho basta con limitarla con el número 0.

Al resolver los dos casos, resulta que el parámetro  $a_2$  origina raíces complejas de módulo unitario para la raíz característica cuando

$$1) \quad K_2 < 6K_3 \quad \text{con} \quad 0 < \omega < \omega_1$$

o bien

$$ii) \quad K_2 \geq 6K_3 \quad \text{con} \quad 0 < \omega < \omega_0$$

En los otros valores de la frecuencia considerada se originan raíces reales.

Pasemos ahora al caso  $q=0$ . Ahora se determinarán las vibraciones de la red para un solo valor de la frecuencia, cuando ésta es igual a  $\omega_1$ . En este caso, tanto el módulo como el argumento del número  $2q$  son iguales a cero. De donde

$$3K_3 a_{1+1} = K_2 \quad ; \quad 1 = 0, 1 \text{ y } 2.$$

Los tres parámetros  $a_1$ ,  $a_2$  y  $a_3$  son reales e iguales, dan--

do tres parejas de raíces características complejas conjugadas de módulo unitario, o bién, dos tripleteas de raíces reales. Se originan tres parejas de raíces complejas iguales, cuando  $-2 < a_{1+1} < 2$ , resultando que estas tres desigualdades se satisfacen solo si  $K_2 < 6K_3$ , en caso contrario las raíces características son reales.

Finalmente para el caso  $q > 0$  tenemos que considerar frecuencias mayores a  $\omega_1$ , la cual quedó definida con la expresión (28). Para estas frecuencias  $2q$  es un número positivo, de donde el módulo es ese valor de  $2q$  y su argumento es 0. Al sustituir el módulo y el argumento de  $2q$  en las ecuaciones (24) se tiene

$$3K_3 a_{1+1} = K_2 + \sqrt[3]{2q} e^{2\pi i l/3}; \quad l = 0, 1, 2$$

Solamente  $a_1$  es un número real y los otros dos son complejos conjugados. Al sustituir  $a_1$  en (22), tenemos valores de las raíces características que son complejas conjugadas de módulo unitario si  $-6K_3 < K_2 + \sqrt[3]{2q} < 6K_3$ . Para determinar el conjunto solución en forma dependiente de la frecuencia, de la masa y de las constantes de interacción, se despeja la raíz cúbica y después se eleva al cubo. Nótese que esta desigualdad no se satisface cuando  $K_2 \geq 6K_3$ , ya que si así fuera se estaría considerando a un número real positivo como un número menor a un número real negativo. Con lo anterior tenemos que para frecuencias mayores a  $\omega_1$ , solo hay raíces complejas de módulo unitario cuando  $K_2 < 6K_3$  y  $\omega_1 < \omega < \omega_0$ .

En resumen, en esta región II, surgen dos posibilidades, dependiendo de si la razón de la interacción a segundos vecinos con la de terceros vecinos es menor a 6, 6 de si es mayor 6 igual a 6. Las soluciones  $U_n$  son iguales, para los dos casos, solo difieren en su forma para la frecuencia  $\omega_1$ , debido a que, cuando  $K_2 < 6K_3$  las raíces iguales son reales; mientras que, al ser  $K_2 \geq 6K_3$  las raíces iguales son complejas conjugadas de módulo uno.

$\omega$	dos raíces reales	dos complejas de módulo no unitario	dos complejas de módulo no unitario
$\omega_0$	dos complejas módulo uno	dos complejas de módulo uno	dos complejas de módulo uno
$\omega_1$	seis raíces complejas de módulo uno		
	dos complejas módulo no uno	dos complejas módulo uno	dos complejas módulo no uno
0			

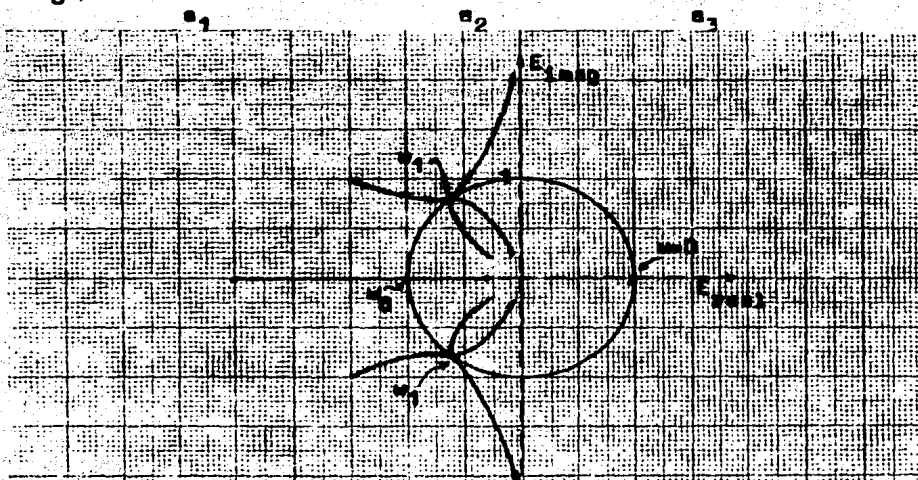


Fig. 5 Comportamiento de las raíces características al variar la frecuencia en la región II, cuando  $K_2/K_3 < 6$

$w$	dos raíces reales	dos complejas módulo no uno	dos complejas módulo no uno
$w_1$	seis raíces reales		
$w_0$	dos complejas de módulo no unitarias	dos raíces reales ----- dos complejas unitarias	dos complejas no unitarias
0	$a_1$	$a_2$	$a_3$

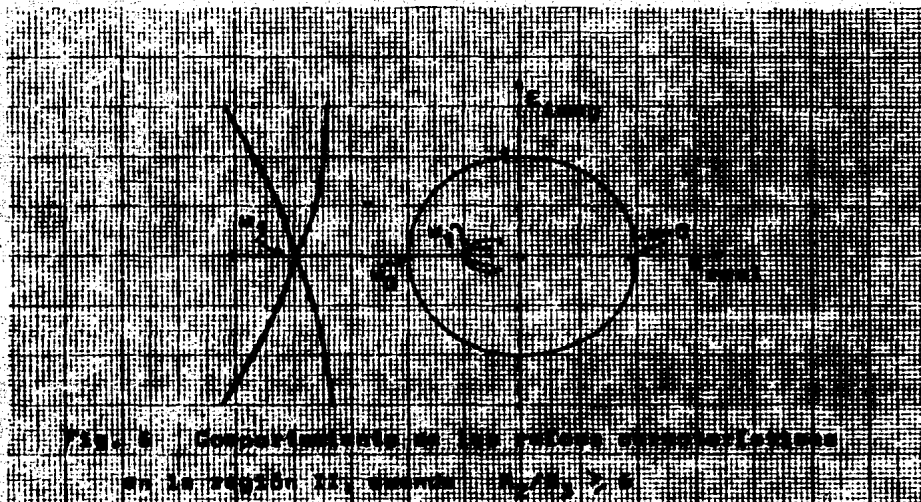


Fig. 6. Comportamiento de las raíces características en la región II, cuando  $\lambda_1/\lambda_2 > 1$ .

En las figuras 5 y 6, se presentan las tablas de los tipos de raíz que se originan al considerar los diferentes parámetros, así como las gráficas de las seis raíces características en el plano complejo, para los dos casos de la región II. En ellas, se observa que las raíces son reales negativas para valores mayores o iguales a la frecuencia de corte  $w_0$ , y que es real positiva igual a la unidad únicamente cuando la frecuencia es nula. De lo analizado, se puede apreciar que  $w_1 < w_0$



cuando  $K_2 < 6K_3$  y  $\omega_0 < \omega_1$  cuando  $K_2 \geq 6K_3$ .

Al saber el comportamiento de las raíces características en las dos regiones, permite escribir las distintas soluciones  $U_n$ , las cuales son:

para  $K_2 < 6K_3$

i) si  $\omega = 0$

$$U_n = C_1 + nD_1 + C_2 R^n \cos(n\theta_1 + D_2) + C_3 R^{-n} \cos(n\theta_2 + D_3)$$

ii) cuando  $0 < \omega < \omega_0$

$$U_n = C_1 \cos(n\theta + D_1) + C_2 R^n \cos(n\theta_2 + D_2) + C_3 R^{-n} \cos(n\theta_2 + D_3)$$

excepto para la frecuencia  $\omega_1$ , ya que en ese caso la solución  $U_n$  tiene la forma

$$U_n = C_1 \cos(n\theta + D_1) + nC_2 \cos(n\theta + D_2) + n^2 C_3 \cos(n\theta + D_3)$$

iii) si  $\omega = \omega_0$

$$U_n = C_1 (-1)^n + nD_1 (-1)^n + C_2 R^n \cos(n\theta_2 + D_2) + C_3 R^{-n} \cos(n\theta_2 + D_3)$$

iv) cuando  $\omega > \omega_0$

$$U_n = C_1 E_1^n + D_1 E_1^{-n} + C_2 R^n \cos(n\theta_2 + D_2) + C_3 R^{-n} \cos(n\theta_2 + D_3)$$

... (29.a)

Al considerar  $K_2 \geq 6K_3$ , las soluciones son de la misma forma que las anteriores, solo hay una frecuencia muy especial en la que la forma de la solución es diferente, ésta es:

si  $\omega = \omega_1$

$$U_n = (C_1 + nC_2 + n^2 C_3) E_1^n + (D_1 + nD_2 + n^2 D_3) E_1^{-n} \dots (29.b)$$

En todas las formas de las  $U_n$ ;  $C_1, C_2, C_3, D_1, D_2$  y  $D_3$  son las constantes arbitrarias,  $\theta$  es el argumento de las raíces de módulo unitario,  $R$  es el módulo de las complejas menores a la unidad y  $\theta_2$  es su argumento. También  $E_1$  es un número real negativo mayor a  $-1$ .

C) CASO  $p < 0$ 

Con lo siguiente, se determinará el comportamiento de la solución cuando las constantes de interacción satisfacen la desigualdad

$$\frac{k_1}{k_3} < 3 + \frac{1}{3} \left( \frac{k_2}{k_3} \right)^2 \quad \dots (30)$$

Para este caso, el proceso matemático es el más complicado, pero es el que da mayor variedad en el comportamiento de la solución, en consecuencia, es el caso que puede explicar un mayor número de situaciones en las vibraciones atómicas. En la fig. 3 el intervalo descrito con la expresión (30), incluye tres regiones del cuadrante de dicha figura: III, IV y V. La variedad en los comportamientos de la solución es tal que tendremos necesidad de subdividir estas regiones. La región III se subdivide en dos, la IV en tres y la región V en dos. Todas ellas se obtienen como consecuencia del análisis. Para  $p < 0$  tenemos que considerar el número  $q + \sqrt{q^2 + p^3}$  como un número complejo en su representación polar, según la expresión (17). Ahora, el número puede ser real positivo, real negativo o incluso un número complejo mixto, dependiendo de si el discriminante de la raíz cuadrada es un número real positivo o negativo. El valor de  $p$  (el cual debe ser negativo), se fija con los valores de las constantes de interacción, asignados al problema. Entonces  $q^2 + p^3$  es negativo o no lo es, según el valor asignado a  $\mu^2$ . Por facilidad, se analizan las diferentes formas de la solución al considerar tres casos: cuando  $q + \sqrt{q^2 + p^3}$  es un

número real positivo, cuando es un complejo mixto o cuando es un número real negativo

$$1) \quad q > \sqrt{-p^3}$$

Al considerar a  $q + \sqrt{q^2 + p^3}$  como un número real positivo se deben de considerar las frecuencias que satisfacen la desigualdad  $q > \sqrt{-p^3}$ . Según la expresión dada en (13.b) las frecuencias deben de satisfacer el siguiente intervalo

$$\omega \geq \sqrt{(3p(K_2 + 6K_3) + (K_2 + 6K_3)^3 + 2\sqrt{-p^3}) / (27mK_3^3)} = \omega_+ \quad .(31.a)$$

Por la extensión de la expresión y como intervendrá varias veces esta frecuencia, se abreviará su representación al utilizar el símbolo  $\omega_+$ , esta frecuencia de corte siempre es positiva.

Con frecuencias mayores a  $\omega_+$ ,  $q^2 + p^3$  es positivo -- siendo el número por determinar en su representación polar, -- también positivo. De donde su módulo  $r$  y su argumento  $\alpha$  están determinados por las siguientes expresiones  $r = q + \sqrt{q^2 + p^3}$  y  $\alpha = 0$ . Al sustituirlos en las ecuaciones (19), se obtiene

$$3K_3 a_{1+i} = K_2 + r^{1/3} e^{2\pi i i/3} - p r^{-1/3} e^{-2\pi i i/3}; \quad i = 0, 1, 2$$

De los tres números  $a_1$ ,  $a_2$  y  $a_3$ , sólo  $a_1$  es real, los otros dos son complejos conjugados.  $a_2$  y  $a_3$  originan raíces complejas de módulo no unitario en todo el intervalo de frecuencias considerado; mientras que  $a_1$ , produce raíces complejas -

de módulo unitario si y solo si

$$-6K_3 < K_2 + r^{1/3} - pr^{-1/3} < 6K_3$$

El proceso de resolución de la anterior desigualdad, es como la resuelta en el caso en que  $p$  es mayor a cero. Como en ella intervienen raíces cúbicas, se analizan las dos desigualdades equivalentes por separado. En cada una de ellas se multiplica por  $r^{1/3}$ , obteniéndose así dos desigualdades cuadráticas en  $r^{1/3}$ . El intervalo solución debe ser la intersección de las frecuencias que satisfacen ambas desigualdades. Una de ellas siempre se verifica, como se compara un número positivo con un número negativo, esto simplifica el análisis a una sola desigualdad, obteniéndose que  $a_1$  origina raíces complejas de módulo unitario solo si

$$r^{2/3} + (K_2 - 6K_3)r^{1/3} < p$$

y éste solo puede dar solución si  $K_2 < 6K_3$ , ya que  $p$  es negativo. Se completa el trinomio cuadrado perfecto, resultando

$$\left(r^{1/3} + \frac{K_2 - 6K_3}{2}\right)^2 < p + \left(\frac{K_2 - 6K_3}{2}\right)^2$$

Esta desigualdad solo tiene validez si el lado derecho de ella es positivo. O sea, debe cumplirse la desigualdad  $K_4/K_3 > (K_2/K_3 + 2)^{2/4} - 1$ ; además, como un requisito anterior es que  $K_2 < 6K_3$ , esto hace que la raíz característica sea un complejo de módulo unitario, como consecuencia del parámetro  $a_1$  en las

frecuencias consideradas, es decir la región IIIa (ver la figura 3).

Las frecuencias que satisfacen la anterior desigualdad, se obtienen como sigue: Primero se resuelve para  $r^{1/3}$ , después se eleva al cubo y se reemplaza  $r$  por su equivalente. Al utilizar la definición (24.b), la desigualdad se simplifica en su notación a

$$q_+^3 - q < \sqrt{q^2 + p^3} < q_-^3 - q$$

La anterior desigualdad solo es válida si  $q < q_-^3$ . Analizando cada desigualdad por separado y utilizando  $q_+ \cdot q_- = p$ , la desigualdad se simplifica aún mas al elevar al cuadrado, permitiendo reemplazar a  $2q$  por su equivalente. Se desarrollan las expresiones cúbicas y se obtiene el intervalo en términos de la frecuencia, siendo equivalente a

$$w_+ < w < w_0$$

Con el anterior resultado se concluye: las raíces características en la región IIIa y para frecuencias mayores a  $w_+$  el parámetro  $a_1$  origina raíces complejas conjugadas de módulo unitario en las frecuencias menores a  $w_0$ . Para frecuencias mayores a  $w_0$ ,  $a_1$  origina raíces que dan vibraciones amortiguadas del tipo 1; o sea, son reales negativas. Para todas las demás regiones: IIb, IV y V; el parámetro  $a_1$  siempre contribuye con raíces reales. Los números  $a_2$  y  $a_3$ , en las regiones de  $p < 0$  y en las frecuencias mayores a  $w_+$  contribuyen en la solución  $U_n$  con dos raíces complejas de módulo no

unitario cada una de ellas, dando un total de cuatro formándose así vibraciones amortiguadas del tipo 2.

$$2) \underline{q^2 + p^3 < 0}$$

Como se están analizando las formas de la solución -- por intervalos de la frecuencia, ahora se considera el caso --  $q^2 + p^3 < 0$ , lo cual se satisface cuando la frecuencia  $\omega$  está comprendida en el intervalo

$$\omega = \sqrt{3p(K_2+6K_3)+(K_2+6K_3)^3 - 2\sqrt{-p^3}} / (27mK_3) < \omega < \omega_+ \dots (31.b)$$

En estos valores de la frecuencia, el número por considerar en su representación polar es un complejo mixto, resultando el módulo igual a  $\sqrt{-p^3}$ , y, su argumento  $\alpha$  es un valor comprendido entre 0 y  $\pi$ , determinándose mediante la expresión  $\cos \alpha = q / \sqrt{-p^3}$ . Considerando lo anterior y sustituyendo los valores de  $r$  y  $\alpha$  en las ecuaciones (19), se determinan los números  $a_1$ ,  $a_2$  y  $a_3$ . Para ello, basta con evaluar las siguientes ecuaciones

$$3K_3 a_{1+1} = K_2 + 2\sqrt{-p} \cos \left( \frac{\alpha + 2\pi l}{3} \right) ; l = 0, 1, 2.$$

Siendo los tres parámetros reales. En los valores de la frecuencia considerados, la solución  $U_n$  permite obtener ondas sinusoidales como vibraciones de la red. Además, es posible obtener vibraciones más complicadas, hasta la superposición de tres trenes de onda con longitudes de onda diferentes, provocando que la propagación del desplazamiento atómico a lo largo de la red sean como pulsos. También se pueden obtener otro tipo de combinaciones.

Como en los casos anteriores, es conveniente obtener los intervalos en los cuales se dan los diferentes tipos de vibración. Para ello, vamos a analizar los casos en que los parámetros originan raíces complejas de módulo unitario. Se sabe que el parámetro  $a_{1+1}$ , origina raíces complejas si se satisface  $-2 < a_{1+1} < 2$ . Al sustituirle la expresión equivalente al parámetro y despejando la relación trigonométrica, se obtiene

$$-\frac{k_2 + 6k_3}{2\sqrt{-p}} < \cos\left(\frac{\alpha + 2\pi l}{3}\right) < -\frac{k_2 - 6k_3}{2\sqrt{-p}} ; l = 0, 1, 2. \quad \dots (32)$$

Para resolver las desigualdades (32) se debe tener presente el campo de variación del ángulo. En consecuencia, se determina la variación que experimenta la relación trigonométrica, para cada valor de  $l$ . Esto permite el análisis de las desigualdades para cuando se satisface en los valores de la frecuencia, para cuando se contradice ó cuando se satisface en parte, de cada una de ellas. El campo de variación de la relación trigonométrica es diferente para cada valor de  $l$ , complicando la resolución; ya que se debe de analizar para cada valor de  $l$ . Empezaremos por el caso

a)  $l = 0$

Como  $\alpha \in (0, \pi)$ , resulta que  $\cos(\alpha/3)$  es un número comprendido entre  $1/2$  y  $1$ . Como ambos números son positivos la desigualdad de la izquierda de (32) siempre se satisface cuando  $l = 0$ . El análisis se reduce, para ese caso al intervalo

$$\frac{1}{2} < \cos(\alpha/3) < -\frac{k_2 - 6k_3}{2\sqrt{-p}}$$

Ésta únicamente se verifica si la expresión de la derecha es positiva, o sea, únicamente podría tener solución si  $K_2 < 6K_3$ . Un siguiente paso en el análisis consiste en observar el comportamiento de la expresión de la derecha de la anterior desigualdad, a ella se le ha exigido el ser positiva. Esta expresión si es menor o igual a  $1/2$ , contradice a la desigualdad estudiada y su contradicción se da cuando  $K_1/K_3 \leq 4K_2/K_3 - 9$ . Lo anterior indica que el intervalo solo podría satisfacerse en las regiones IIIa y IVa (ver fig. 3). Otra consideración para tenerse en el estudio es cuando la expresión de la derecha es mayor o igual a la unidad, en ese caso el intervalo analizado se satisface en todos los valores de la frecuencia considerados. Esto sucede cuando  $K_1/K_3 \geq (K_2/K_3 + 2)^2/4 - 1$ . Con esto se concluye que el intervalo por resolver, solo se resuelve para la región IVa, ya que en la región IIIa siempre es válido y en las demás no se satisface.

Al resolver el intervalo, para la región IVa, se utiliza el teorema: si  $1/2 < a < b$  entonces  $4a^3 - 3a < 4b^3 - 3b$ . Se puede formar  $4\cos^3(\alpha/3) - 3\cos(\alpha/3)$ , lo cual es equivalente a  $\cos\alpha$  y después se reemplaza por su igual  $q/\sqrt{-p}$ . Al simplificar y sustituir los valores de  $p$  y de  $q$  definidos en el anterior capítulo, resulta que el intervalo solo tiene solución con los valores menores a  $w_0$ .

En conclusión, el número  $a_1$  de raíces complejas conjugadas de módulo uno, cuando

$$1) \quad w_- < w < w_+ \quad \text{y} \quad K_1/K_3 \geq (K_2/K_3 + 2)^2/4 - 1$$

(región IIIa)



o bien

$$ii) \omega_- < \omega < \omega_0 \quad \text{y} \quad 4K_2/K_3 - 9 < K_1/K_3$$

$$\text{Además, } K_1/K_3 \geq (K_2/K_3 + 2)^2/4 - 1; \quad (\text{región IVa})$$

Para las frecuencias mayores a  $\omega_0$  en la región IVa,  $a_1$  origina raíces reales. También sucede esto en las demás regiones no consideradas.

b)  $l = 1$

Para analizar el tipo de raíz característica que se origina como consecuencia del parámetro  $a_2$ , se tiene que considerar  $l = 1$ . Ahora se debe tener presente la variación de  $\text{Cos}((\alpha + 2\pi)/3)$ , la cual varía entre los números  $-1$  y  $-1/2$ . Esta información se utiliza primero para analizar cuando la desigualdad se satisface con todos los valores de la frecuencia considerada, o bien cuando ninguna frecuencia la satisface o simplemente cuando se satisface en parte.

El intervalo determinado por la expresión (32) cuando  $l = 1$ , es un poco más complicado que el caso  $l = 0$ , ya que es más extenso en su desarrollo, debido a que se deben de analizar dos expresiones. Primero vemos la expresión de la izquierda del intervalo (32). Cuando ésta es menor o igual a  $-1$ . Esta condición se satisface cuando  $K_1/K_3 \geq (K_2/K_3 - 2)^2/4 - 1$ , o sea, la desigualdad de la izquierda del intervalo considerado, se satisface para todas las frecuencias consideradas cuando las constantes de interacción satisfagan las condiciones de las regiones III y IV (Ver la fig.3 para tener una mejor idea de las regiones). La expresión de la izquierda de (32) siempre es menor a  $-1/2$ , de donde la desigualdad de la izquierda podría tener su

luciones en las regiones V.

Siguiendo el mismo tipo de análisis, ahora se hace - este para la desigualdad de la derecha del intervalo (32). Ella es positiva cuando  $K_2 < 6K_3$ , lo que hace que la desigualdad de la derecha siempre se verifique para estos valores de las constantes de interacción. También puede verificarse la desigualdad de la derecha para  $K_2 \geq 6K_3$ , pero se debe considerar dicha expresión mayor o  $-1/2$ , esto se satisface cuando  $K_1/K_3 < 4K_2/K_3 - 9$ . La desigualdad (32) se contradice cuando la expresión de su derecha sea menor o igual a  $-1$  y esto se dé cuando  $K_2 \geq 6K_3$  y  $-- K_1/K_3 \geq (K_2/K_3 + 2)^2/4 - 1$ , que son las condiciones de la región III b.

Como la solución del intervalo se logra al intersectar los conjuntos solución de ambas desigualdades, se concluye que - en las regiones IIIa, IVa y IVb, el número  $a_2$  siempre origina raíces complejas de módulo uno; de raíces reales en todo el intervalo de frecuencias, en la región IIIb; mientras que, en las regiones IVc y V podría satisfacerse en parte. Para la región - IVc, el intervalo para la relación trigonométrica se limita por la izquierda con el número  $-1$  y por la derecha con la expresión del intervalo. El intervalo para la región Va, se limita por - la izquierda con la expresión de la izquierda de (32) y por la derecha con  $-1/2$ . La región Vb, se limita con las dos expresiones.

Al resolver los intervalos, se aplica el teorema: Si  $- b < a < -1/2$ , entonces  $4b^3 - 3b < 4a^3 - 3a$ . En resumen, el parámetro  $a_2$  origina raíces complejas conjugadas de módulo unitario cuando:

- i)  $\omega_- < \omega < \omega_+$  en las regiones IIIa, IVa y IVb  
 ii)  $\omega_- < \omega < \omega_0$  en la región IVc  
 iii)  $0 < \omega < \omega_+$  en la región Va  
 iv)  $0 < \omega < \omega_0$  en la región Vb

Se puede observar además que en las regiones V, los intervalos de las frecuencias son para valores mayores al cero, esto es - debido a que en estas regiones  $\omega_-$  son números imaginarios.

c)  $l=2$

En este caso se analiza el tipo de raíz que se origina al considerar el parámetro  $a_2$ . Para hacerlo, se resuelve el intervalo (32) cuando  $l=2$ . Resulta en esta consideración que, - la relación trigonométrica del ángulo en turno es un número com prendido entre  $-1/2$  y  $1/2$ . Por lo concluido cuando  $l=1$ , la desigualdad de la izquierda siempre se satisface, como consecuencia basta con analizar

$$-\frac{1}{2} < \cos \frac{\alpha + 4\pi}{3} < -\frac{K_2 - 6K_3}{2\sqrt{-p}}$$

ésta es válida para todas las frecuencias, cuando la expresión de la derecha es mayor o igual a  $-1/2$ , y se satisface cuando  $---$   $K_2 < 6K_3$  y  $K_1/K_3 \geq 4K_2/K_3 - 9$ . Se contradice cuando el lado derecho es menor o igual a  $-1/2$ , y esto sucede para  $K_2 > 6K_3$  y  $K_1/K_3 \geq 4K_2/K_3 - 9$ .  $a_2$  podría originar raíces complejas en las regiones IVb y Va, para saberlo se resuelve la desigualdad. Ahora, es conveniente utilizar el siguiente teorema: si  $-1/2 < a < b < 1/2$ , entonces  $4b^3 - 3b < 4a^3 - 3a$ . De donde resulta que las frecuencias que la satisfacen son las mayores a  $\omega_0$ .

En resumen, las raíces características son complejas

conjugadas de módulo uno, cuando:

$$1) \quad \omega_- < \omega < \omega_+ \quad \text{en las regiones IIIa y IVa}$$

$$11) \quad \omega_0 < \omega < \omega_+ \quad \text{en las regiones IVb y Va}$$

En las demás consideraciones  $a_3$  origina raíces reales.

$$3) \quad q < -\sqrt{-p^3}$$

Por último se considerarán frecuencias menores o iguales a  $\omega_1$  y con ellas veremos la forma de las raíces características. Con estos valores de la frecuencia hay que recordar que en las regiones V, no es posible aplicarlo porque ahí  $\omega_-$  es imaginario. Para las regiones III o IV, si hay comportamiento de las raíces para frecuencias menores a  $\omega_-$ . En estas frecuencias  $q^2 + p^3$  es negativo. Al interpretar a dicho número negativo como un complejo en la forma polar, su módulo es el número multiplicado por  $-1$  y su argumento es  $\pi$ . Con estos valores al sustituirlos en (19), se obtiene

$$3K_3 a_{1+1} = K_2 + r^{1/3} e^{(\pi+2\pi l)1/3} - pr^{-1/3} e^{-(\pi+2\pi l)1/3};$$

$$l = 0, 1 \text{ y } 2$$

De ellas, solo  $a_2$  es un número real puro y se originan raíces complejas de módulo uno si  $-2 < a_2 < 2$ . Al sustituirle  $a_2$  y como  $e^{3\pi i} = -1$ , se obtiene

$$-6K_3 < K_2 - r^{1/3} + pr^{-1/3} < 6K_3$$

Siguiendo el proceso utilizado anteriormente, el intervalo se descompone en sus dos desigualdades equivalentes. Cada una se multiplica por  $r^{1/3}$ , después se completan los trinomios cuadrados perfectos, y se llega a

$$\left(r^{1/3} - \frac{k_2 + 6k_3}{2}\right)^2 < p + \left(\frac{k_2 + 6k_3}{2}\right)^2$$

y

$$\left(r^{1/3} - \frac{k_2 - 6k_3}{2}\right)^2 > p + \left(\frac{k_2 - 6k_3}{2}\right)^2$$

La primera da soluciones siempre que su lado derecho sea positivo, esto se logra solo en las regiones III y IV. La segunda, si su lado derecho es negativo significa que siempre se cumple. Esto sucede cuando  $k_2 < 6k_3$ , o bien, cuando  $k_1/k_3 < (k_2/k_3 + 2)^2/4 - 1$ . En la única región en la que no es tautológica es en la región IIIb. Con este pequeño análisis, se puede afirmar que la región IIIa y las regiones IV se describen con la primera de igualdad y para la región IIIb se deben de considerar las dos desigualdades. Para las demás regiones las raíces son reales.

Al resolver ambas desigualdades, es conveniente utilizar las definiciones (24), de donde  $a_2$  de complejas conjugadas de módulo uno, solo si

i)  $0 < w < w_-$  en las regiones IIIa y IV

ii)  $0 < w < w_0$  en la región IIIb

En los demás casos,  $a_2$  origina raíces reales; mientras que los números  $a_1$  y  $a_3$ , en estas frecuencias, dan raíces complejas de módulo no unitario.

En las figuras 7 a 13, se presentan las tablas que resumen todo el análisis desarrollado, así como también se grafican las raíces características en el plano complejo. En todas ellas, se aprecia que en la frecuencia nula siempre hay dos raíces reales iguales a la unidad y al aumentar el valor de la frecuencia esas raíces se comportan como complejas conjugadas

de módulo uno, después pueden volverse reales negativas o complejas de módulo no unitario, dependiendo de las constantes de interacción.

$w_1$	dos raíces reales	dos complejas de módulo no unitario	dos complejas de módulo no unitario
$w_0$			
$w_+$	dos complejas de módulo uno	dos complejas de módulo uno	dos complejas de módulo uno
$w_-$			
0	dos complejas de módulo no unitario	dos complejas de módulo uno	dos complejas de módulo no unitario
	$a_1$	$a_2$	$a_3$

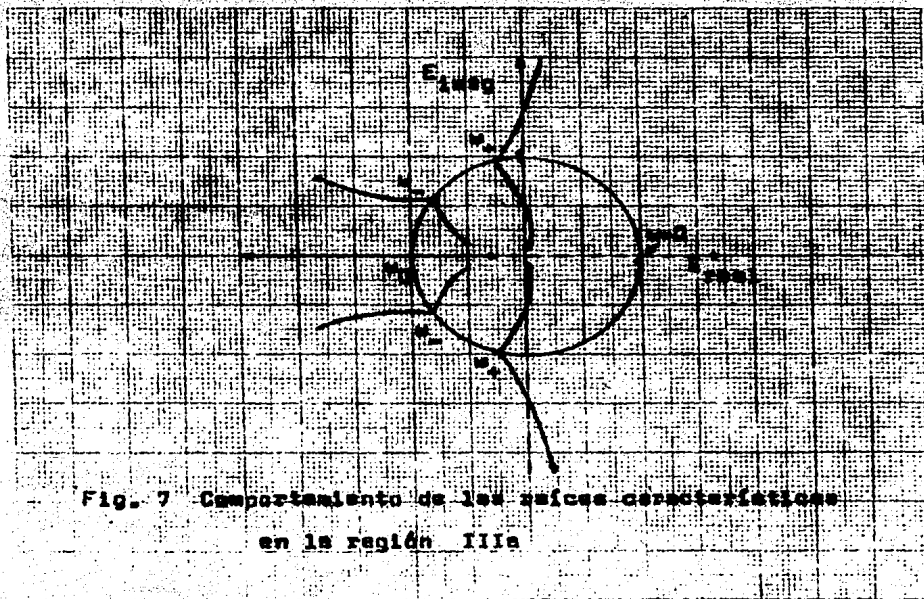


Fig. 7 Comportamiento de las raíces características en la región IIIa

$\omega$ $\omega_1$ $\omega_2$ $\omega_3$ $\omega_0$ $0$	dos raíces reales	dos complejas de módulo no unitario	dos complejas de módulo no unitario
		dos raíces reales	dos raíces reales
	dos complejas de módulo no unitario	reales	dos complejas de módulo no unitario
		dos complejas de módulo uno	dos complejas de módulo no unitario
	$\omega_1$	$\omega_2$	$\omega_3$

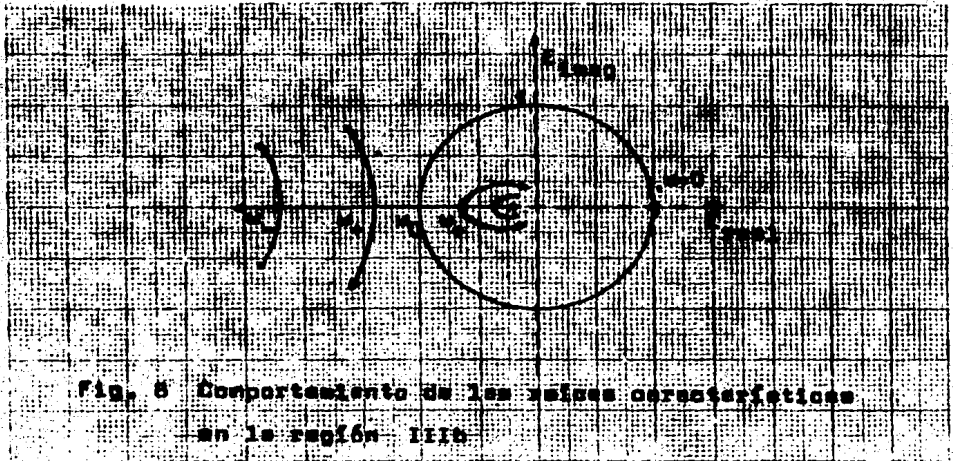


Fig. 6 Comportamiento de las raíces características en la región IIIb

$w$ $w_+$ $w_0$ $w_-$ $0$	dos raíces reales	dos complejas de módulo no unitario	dos complejas de módulo no unitario
	dos complejas de módulo uno	dos complejas de módulo uno	dos complejas de módulo uno
	dos complejas de módulo no unitario		dos complejas de módulo no unitario
	$\mu_1$	$\mu_2$	$\mu_3$

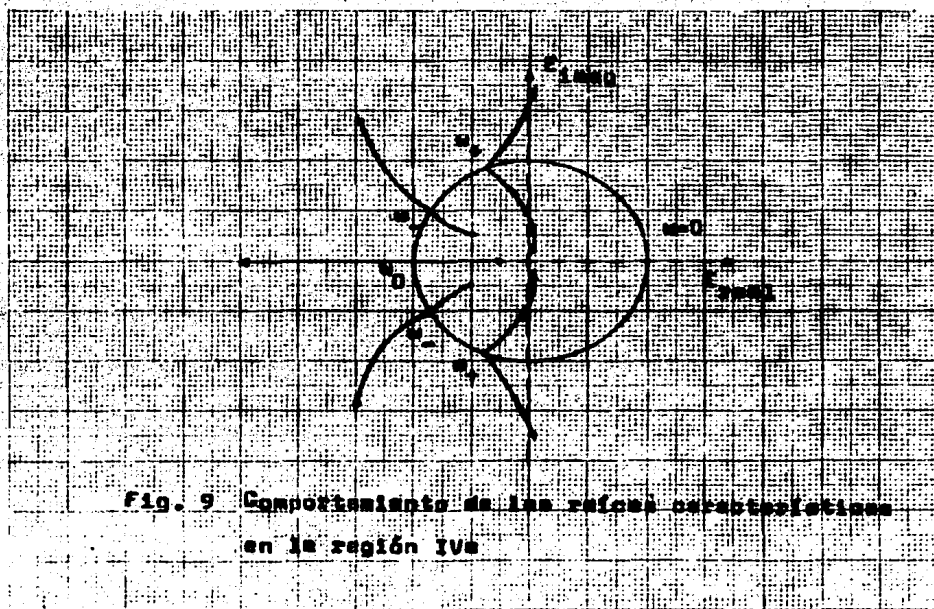


Fig. 9 Comportamiento de las raíces características en la región IVa



E	dos raíces reales	dos complejas de módulo no unitario	dos complejas de módulo no unitario
	dos complejas de módulo no unitario	dos complejas de módulo uno	dos complejas de módulo uno
0			
	$a_1$	$a_2$	$a_3$

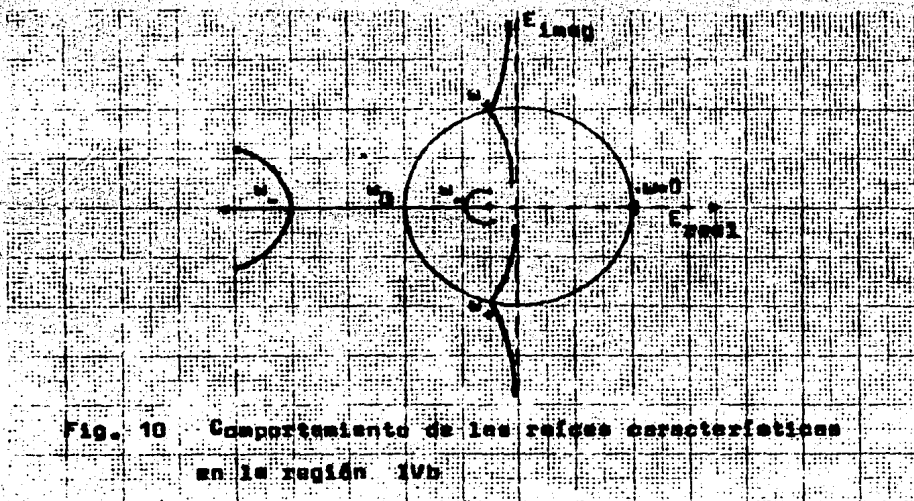


Fig. 10 Comportamiento de las raíces características en la región IVb

$\omega$ $+$ $0$ $-$ $0$	dos raíces reales	dos complejas de módulo no unitario	dos complejas de módulo no unitario
		dos reales negativas	dos raíces reales
	dos complejas de módulo no unitario	dos complejas de módulo uno	dos complejas de módulo no unitario
	$a_1$	$a_2$	$a_3$

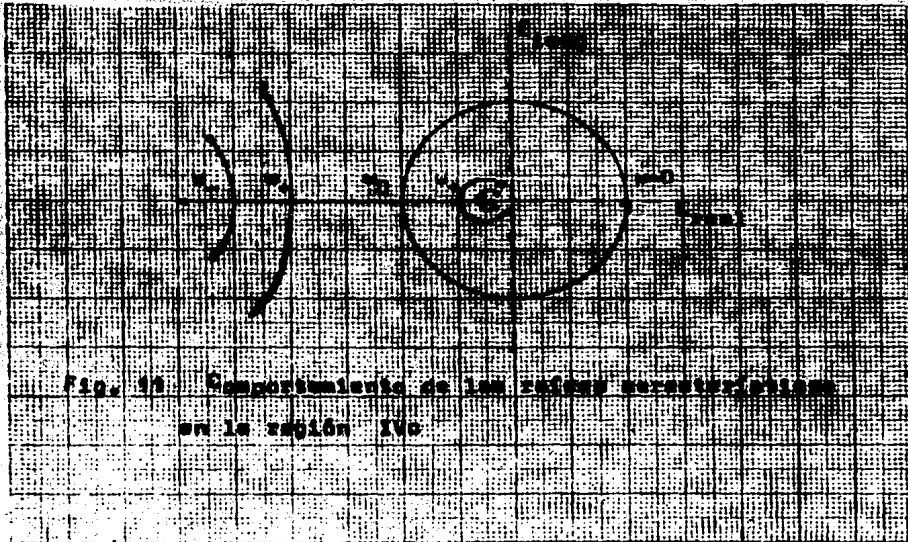


Fig. 48. Comportamiento de las raíces características en la región IVa

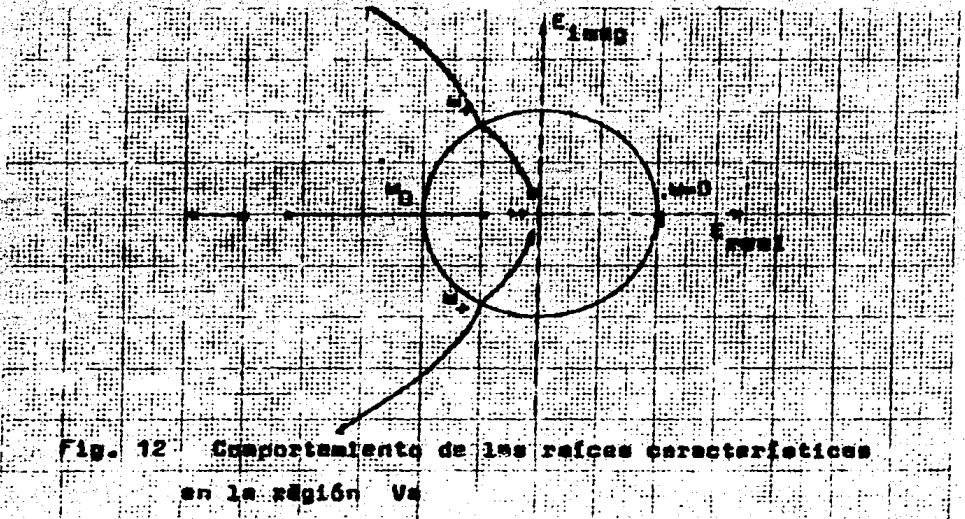
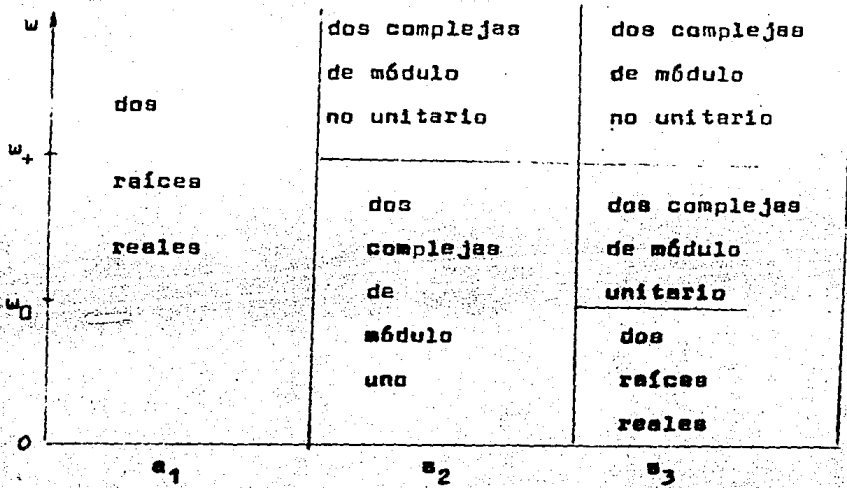


Fig. 12 Comportamiento de las raíces características en la región  $V_a$



Con las figuras anteriores, se pueden construir las formas de la solución, para cada valor de la frecuencia. La manera de hacerlo es la siguiente: . . . (34)

i) cuando el parámetro que produce dos raíces complejas de módulo uno, como estas son conjugadas, definen un término en la solución  $U_n$  de la forma

$$C_1 \cos(n\theta_1 + D_1)$$

En dicho término,  $\theta_1$  es el argumento principal de las raíces complejas. Cada uno de esos términos contribuyen en la solución con dos constantes arbitrarias.

ii) Cada parámetro que origine dos raíces reales negativas, como son inversas, anexan a la solución dos sumandos de la forma

$$C_1 E_1^n + D_1 E_1^{-n} \quad \text{con} \quad -1 < E_1 < 0$$

también contribuyen en la solución con dos constantes arbitrarias

iii) En cada parámetro que origine dos raíces características complejas de módulo no unitario, los módulos son inversos. Cuando esto sucede, siempre hay otro parámetro que produce raíces características complejas de módulo no unitario y estas son las conjugadas a las raíces del otro parámetro. Al acontecer esto los dos parámetros contribuyen en la solución con cuatro constantes arbitrarias y se anexan a la solución dos sumandos en la forma siguiente

$$C_1 R^n \cos(n\theta_3 + D_1) + C_3 R^{-n} \cos(n\theta_3 + D_3)$$

en donde  $R$  es el módulo de las complejas con valor menor a la unidad y  $\theta_3$  su argumento

iv) Cuando hay dos parejas de raíces reales, a la solución se

le anexan cuatro sumandos, que contribuyen con cuatro constantes arbitrarias y tienen la forma

$$(C_1 + nC_3)E_1^n + (D_1 + nD)E_1^{-n}$$

si son tres las raíces que se repiten, se añaden en cada uno de los paréntesis otro sumando, formándose con una constante arbitraria multiplicada con  $n^2$ .

v) Cuando hay dos parejas de raíces complejas conjugadas de módulo unitario, que sean iguales, a la solución se le anexan los sumandos  $C_1 \cos(n\theta + D_1) + nC_3 \cos(n\theta + D_3)$

Si fueran tres las raíces que se repiten, se suma un tercer término de la forma igual, con el mismo argumento y se le agregan otras constantes arbitrarias. Además se multiplica con  $n^2$ .

Para entender mejor, hagamos un ejemplo. En la región Vb, para las frecuencias comprendidas en el intervalo  $0 < \omega < \omega_0$ , se tienen dos parámetros que originan raíces reales y uno que origina dos complejas de módulo uno. Para este caso, la solución tendrá la siguiente forma

$$U_n = C_1 E_1^n + D_1 E_1^{-n} + C_2 \cos(n\theta_2 + D_2) + C_3 E_3^n + D_3 E_3^{-n}$$

Con el análisis anterior tenemos la forma de la solución general en las diferentes regiones de frecuencias como función de las relaciones que satisfacen los parámetros del sistema. Esto significa que hemos obtenido la solución general a este problema en una forma analítica.

### CAPITULO III. ANALISIS CUALITATIVO DE LOS ESPECTROS DE FRECUENCIAS

En este capítulo se continua el análisis de la red con el propósito de establecer la relación existente entre la frecuencia y las raíces características. Como pudo establecerse en los capítulos anteriores, las raíces son reales ó complejas. En ambos casos, la raíz característica se puede escribir en su representación polar como

$$E = R e^{i\theta} \quad \dots (35)$$

En la representación anterior se identifica a  $\theta$  como el argumento de la raíz característica. También se identifica a  $R$  como el módulo de dicha raíz característica, el cual indica el grado en que la vibración diverge o se atenúa en la red, lo llamaremos el módulo de amortiguamiento.

Cualquier valor de  $\theta$  en el intervalo  $(2l - 1)\pi \leq \theta \leq (2l + 1)\pi$ , siendo  $l$  cualquier entero, al no modificar el valor de la raíz característica, determina un movimiento vibratorio que comprende ciertos desplazamientos atómicos posibles. Sin embargo, a cada conjunto de desplazamientos atómicos que hay en algún intervalo se puede asociar con otro valor de  $\theta$  de cualquier otro intervalo. Esto permite concluir que existen muchas representaciones del mismo patrón de desplazamientos atómicos, los cuales tienen la misma frecuencia pero incluyen distintos valores de  $\theta$ . El hecho físico importante es que cualquier arreglo posible de posiciones atómicas se puede representar con el argumento principal de  $\theta$ , el cual está contenido

en el intervalo  $-\pi \leq \theta \leq \pi$ . Por consiguiente no es necesario considerar las vibraciones que no pertenezcan a este intervalo central, conocido también como la primera zona de Brillouin.

Sustituyendo la raíz característica con su representación polar en la ecuación auxiliar (8) y dividiéndola por el cubo de la raíz, se obtiene

$$m\omega^2 + \sum_{j=1}^{j=3} K_j (R^j e^{j\theta i} + R^{-j} e^{-j\theta i} - 2) = 0$$

Al descomponer la notación polar en el complejo equivalente, y utilizando algunas identidades trigonométricas, la anterior ecuación es equivalente a

$$\begin{aligned} m\omega^2 + \sum_{j=1}^{j=3} K_j (R^j + R^{-j}) \cos j\theta - 2 + \\ + 1(R - R^{-j}) \sin \theta \cdot (K_3(4\cos^2\theta - 1)(R + R^{-1})^2 + \\ 2K_2 \cos \theta \cdot (R + R^{-1}) + K_1 - K_3(4\cos^2\theta - 1)) = 0 \end{aligned} \quad \dots (36)$$

Para que la ecuación (36) pueda satisfacerse, es necesario que tanto la parte real como la parte imaginaria sean nulas. De forma tal que tengamos un sistema de dos ecuaciones para  $R$  y  $\theta$ . Esto al final de cuentas, permite la relación de la frecuencia en función del módulo  $\delta$  en función del argumento de la raíz característica. La parte imaginaria de la ecuación (36) se anula en tres casos, estos son los correspondientes a los tres tipos de vibraciones simples en la red: vibración sinusoidal, vibración amortiguada tipo 1 y vibración amortiguada tipo 2. Debido a las tres posibles anulaciones de la



parte imaginaria, el estudio del espectro de frecuencias se hará para cada uno de esos tres casos. Tenemos que recordar que estas vibraciones fueron encontradas por primera vez en el análisis de las redes que incluyen interacciones a primeros y segundos vecinos [4], sin embargo como aparecen también en nuestro caso aquí exhibiremos la forma en que estos se presentan.

#### A) VIBRACIONES SINUSOIDALES

Cuando el módulo de amortiguamiento de la raíz característica es unitario, las vibraciones de la red tienen un comportamiento sinusoidal. Este tipo de vibración no diverge ni se amortigua a lo largo de ella. Sustituyendo  $R = 1$  en la ecuación (36), la parte imaginaria se anula, quedando únicamente la parte real, y ésta es equivalente a

$$m\omega^2 + \sum_{j=1}^{j=3} 2K_j (\cos j\theta - 1) = 0$$

Al reemplazar la identidad trigonométrica  $\cos 2\theta = 1 - 2\sin^2\theta$ , la ecuación anterior se transforma en

$$m\omega^2 = 4K_1 \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) + 4K_2 \sin^2(\theta) + 4K_3 \sin^2\left(\frac{3}{2}\theta\right) \dots (37)$$

Como las vibraciones sinusoidales son periódicas en las coordenadas lineales, el argumento de la raíz característica se puede relacionar con la longitud de onda  $\lambda$  mediante la expresión  $\lambda = 2\pi/\theta$ . La ecuación (37) es exactamente la misma que la encontrada por Brillouin [1] por primera vez. Hay que hacer notar que en el trabajo anterior la solución que se pro-

pone para los modos normales de vibración en una red monoatómica con interacción a primeros, segundos y terceros vecinos es de carácter heurístico. Si en la ecuación (37) se reemplaza  $\theta$  por  $-\theta$ , la ecuación no se altera, significando esto que siempre que haya un valor de  $\theta$  que la satisfaga, al asignar un valor de la frecuencia, también está como solución el valor de  $-\theta$ , de donde la ecuación (37) acepta 2, 4 o 6 soluciones reales al asignar un valor de la frecuencia.

La ecuación (37) indica que si la red monoatómica tiene un desplazamiento atómico como consecuencia de uno, dos o hasta tres trenes de onda, estas vibraciones sinusoidales simples se dan siempre y cuando la frecuencia de vibración de cada átomo  $\omega$  y el número de onda, de cada vibración sinusoidal se relacionen. Si la amplitud de la raíz característica  $\theta$  y la frecuencia  $\omega$  no satisfacen la expresión (37), entonces la raíz característica no provoca un desplazamiento atómico descrito mediante una vibración sinusoidal.

En las figuras 14 y 15, se grafica  $m\omega^2/K_1$  vs.  $\theta$ , para las vibraciones sinusoidales. Se deja fijo el cociente  $K_1/K_2$  y se hace variar la interacción al tercer vecino, con el propósito de compararlo con la relación de dispersión que incluye interacción al segundo vecino, y así, poder apreciar la interacción sufrida por la frecuencia al considerar la interacción al tercer vecino. Con estas figuras se completa el análisis desarrollado en el capítulo anterior, y se entienden mejor las gráficas. Por ejemplo, en la fig. 14, se considera  $K_1/K_2 = 2$  como un valor fijo. Al variar  $K_3$ , se consideran los cocientes  $K_1/K_3$  permitiendo utilizar valores entre estos cocientes como

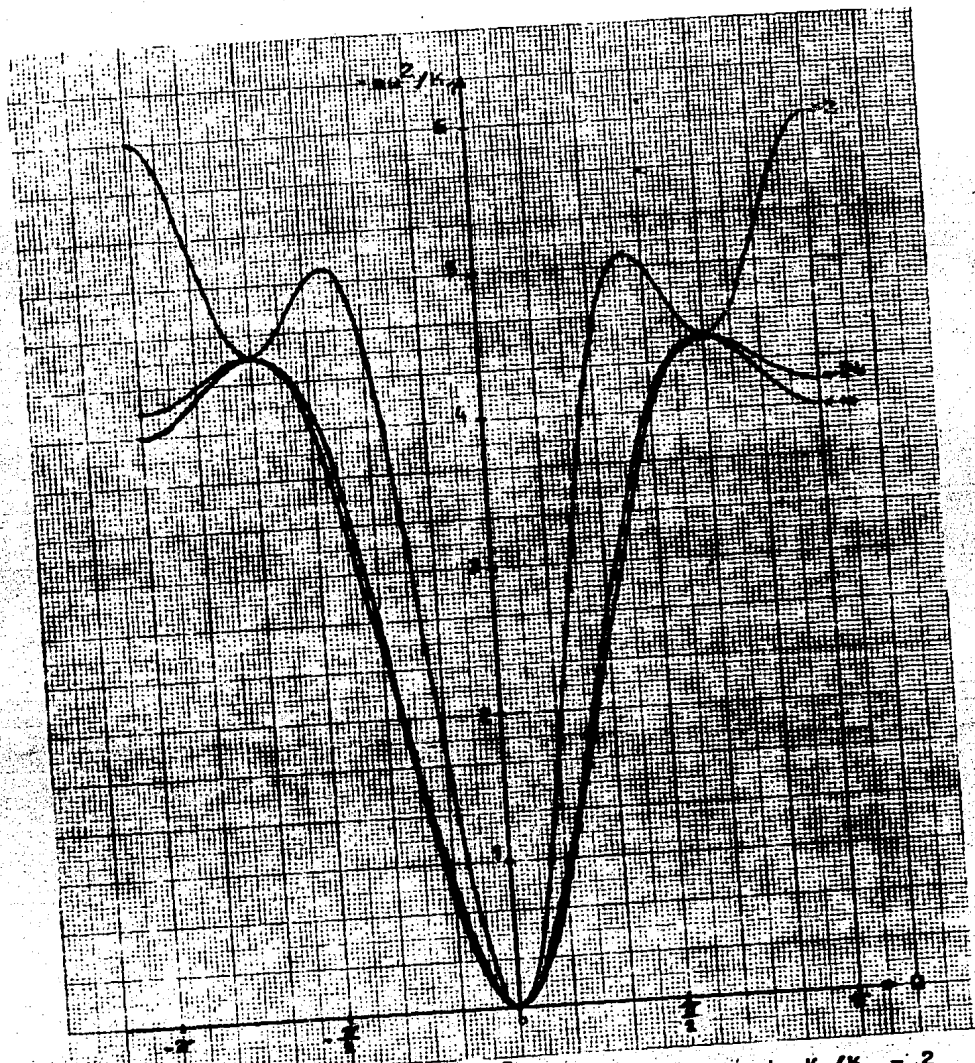


Fig. 14 Gráfica de  $\mu^2/K_1$  vs  $\theta$ , cuando  $K_1/K_2 = 2$   
para diferentes valores de  $K_1/K_3$

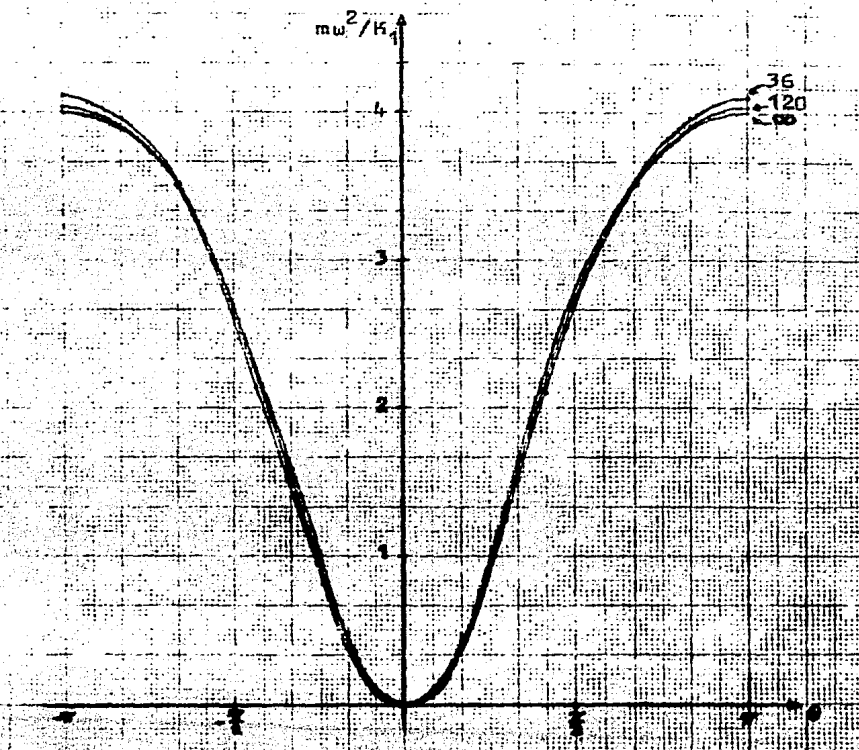


Fig. 15 Gráfica de  $mw^2/K_1$  vs  $Q$ , cuando  $K_1/K_2 = 6$ , para diferentes valores de  $K_1/K_3$

una relación lineal, entre ellos, de pendiente 2, en el cuadrante de las constantes de interacción, ver fig. 3. Y así, se incluyen varias de las regiones definidas ahí. Al considerar valores de las constantes de interacción de la región IIIa,  $K_1/K_3$  es igual a 2, el comportamiento del espectro de frecuencias es

tal que al aumentar los valores de  $\theta$ , de 0 a  $\pi$ , este va creciendo y llega a un valor máximo, el valor máximo es  $w_+$ , obtenido en el capítulo anterior y, empieza a disminuir obteniéndose un valor mínimo  $w_-$ , para luego los valores de la frecuencia aumentar a otro máximo relativo  $w_0$ . en esta región IIIa se tiene  $w_0 > w_+$ , ver la fig. 7. Al aumentar el valor de  $K_1/K_3$ , que es lo mismo que disminuir el valor de la constante de interacción al tercer vecino, pero dejando fijo  $K_1/K_2 = 2$ , tanto  $w_+$  como  $w_-$  como  $w_0$  disminuyen de valor, aunque mas rapidamente lo hace  $w_0$ . Al considerar la región IVa,  $w_0$  sigue siendo un máximo relativo solo que es menor a  $w_+$ . Después, al considerar valores de las constantes de interacción en la región IVb ( $K_1/K_3 = 24$ ),  $w_-$  deja de ser un mínimo relativo y  $w_0$  toma su lugar como mínimo. Finalmente al considerar la región Va, en ella el comportamiento es como los de la región IVb, pero al ir disminuyendo  $K_3$  se llega al límite cuando se considera la interacción a primeros y segundos vecinos, en el caso en que  $K_1/K_2 = 2$ .

Para cualquier valor que se considere de  $K_1/K_2 < 4$ , al hacer crecer  $K_1/K_3$  se están considerando constantes de interacción cuyos cocientes se localizan en la región Va, dando con ello un máximo y un mínimo. Hay que notar que en el límite siempre coincide con lo obtenido en la interacción hasta el segundo vecino. En cambio al asignar valores de  $K_1/K_3 \gg 4$ , ver fig. 15, el espectro de frecuencias es parecido si se toman valores de las interacciones incluidas en la región I, II, IIIb, IVc y Vb; en ellas la frecuencia va aumentando hasta llegar a un valor máximo,  $w_0$ , cuando  $\theta = \pi$ .

Al dejar fijo el valor de  $K_1/K_2$ , en las figuras 14 y 15, se observa que al asignar valores diferentes de  $K_3$  de forma tal que se hace mayor la influencia de  $K_3$  en la red monoatómica, el espectro de frecuencias queda por encima de la anterior. Coincidiendo en unos puntos muy especiales: cuando  $\theta = 0$  y cuando  $\theta = \pm 2\pi/3$ .

De acuerdo a la relación (37), si la red acepta como vibración una onda sinusoidal que se propaga a lo largo de ella, cuando se restringen los valores de  $k$  a valores mucho menores de  $\pi/a$  (equivalente a longitudes de onda mucho mayores al doble de la distancia interatómica) la frecuencia es aproximadamente lineal con su número de onda ya que en ese caso  $\text{Sen } lka/2 \approx lka/2$  para  $l = 1, 2$  y  $3$ ; y

$$\omega \approx ak \sqrt{(K_1/m)(1 + 4K_2/K_1 + 9K_3/K_1)} \quad . . . (38)$$

En este límite, la velocidad de fase  $\omega/k$  y la velocidad de grupo  $d\omega/dk$  son esencialmente constantes e iguales. En consecuencia, en las longitudes de onda largas, los efectos de dispersión son prácticamente imperceptibles. Comportándose el medio como si fuera elástico, continuo y homogéneo. Al aumentar los valores de  $k$ , cada vez los efectos de dispersión son importantes y la frecuencia ya no varía en forma lineal dependiente de  $k$ .

### B) VIBRACIONES AMORTIGUADAS TIPO 1

La ecuación (36) da el espectro de frecuencias para los valores reales de las raíces características. Para ello, se considera la anulación de la parte imaginaria de dicha ecuación cuando  $\text{Sen } \theta = 0$ ; o sea, cuando  $\theta = j\pi$ . Al evaluar  $\text{Cos } \theta$  cuando  $\theta$  es un múltiplo de  $\pi$ , da como resultados  $-1$  y  $+1$ . Por ello, se considerarán los casos cuando  $j$  es par y cuando es impar. Al considerar  $j$  par y al reemplazar  $j\pi$  en la ecuación (36), la ecuación se reduce a una en la cual las soluciones para la frecuencia deben ser imaginarias, de donde se descartan estos valores de  $j$ .

Los únicos valores de  $j\pi$  que hacen que la relación (36) sea aceptable, son los valores impares de  $j$ , resultando para esos casos

$$m\omega^2 = K_1 \frac{(R+1)^2}{R} - K_2 \frac{(R^2-1)^2}{R^2} + K_3 \frac{(R^3+1)^2}{R^3} \dots \quad (38)$$

Si en la ecuación anterior se reemplaza  $R$  por  $R^{-1}$  este no se altera, por tanto al haber la solución  $R$  también  $R^{-1}$  es solución. La ecuación (39) acepta soluciones por pares inversas y puede tener hasta seis soluciones reales.

Los valores de la raíz característica, cuando se satisface la relación (39), son negativos. Ya que, al tener como únicos valores posibles para el argumento los valores impares de  $j\pi$ , estos valores se reemplazan en la consideración (35) y se obtiene  $E = -R$ , entonces  $U_{n+1} = -RU_n$ . Esto significa que dos desplazamientos contiguos son contrarios y que sus máximos desplazamientos uno es mayor que el otro  $R$  veces. Este

tipo de vibración dependiendo del valor de  $R$ , crece o se atenúa hacia un solo lado de la red, por ello el módulo  $R$  de la raíz característica se le llama el módulo de amortiguamiento y a este tipo de vibración le hemos llamado vibraciones amortiguadas tipo 1.

En las figuras 16 y 17, se grafica  $m\omega^2/K_1$  vs  $R$  para varios valores de las constantes de interacción atómica. Se utilizan los mismos valores de las constantes que fueron usadas en el caso de las vibraciones sinusoidales (fig. 14 y 15), para completar la información. En todas ellas el valor de la frecuencia asociado con el módulo de amortiguamiento  $R = 1$  es  $\omega_0 = \sqrt{4(K_1 + K_3)/m}$  y esta puede ser un máximo o un mínimo. Cuando una gráfica tiene un máximo o mínimo, para  $R \neq 1$ , el máximo corresponde a  $\omega_+$  y el mínimo a  $\omega_-$ , los cuales ya fueron determinados en el capítulo anterior. En ellas se observa que al ser la influencia del tercer vecino muy fuerte, el módulo de amortiguamiento se aproxima a la unidad, aunque también la frecuencia  $\omega_0$  se hace cada vez mas grande.

En la fig. 17, se aprecia en la gráfica para  $K_1/K_3 = 120$  un intervalo de frecuencias en el cual hay seis módulos de amortiguamiento para un solo valor de la frecuencia. Significando esto, que para esos valores de la frecuencia, la vibración de la red se forma hasta con seis raíces reales negativas. O sea, para esas frecuencias, la red no acepta vibraciones sinusoidales ni vibraciones amortiguadas del otro tipo, acepta únicamente las vibraciones amortiguadas del tipo 1.



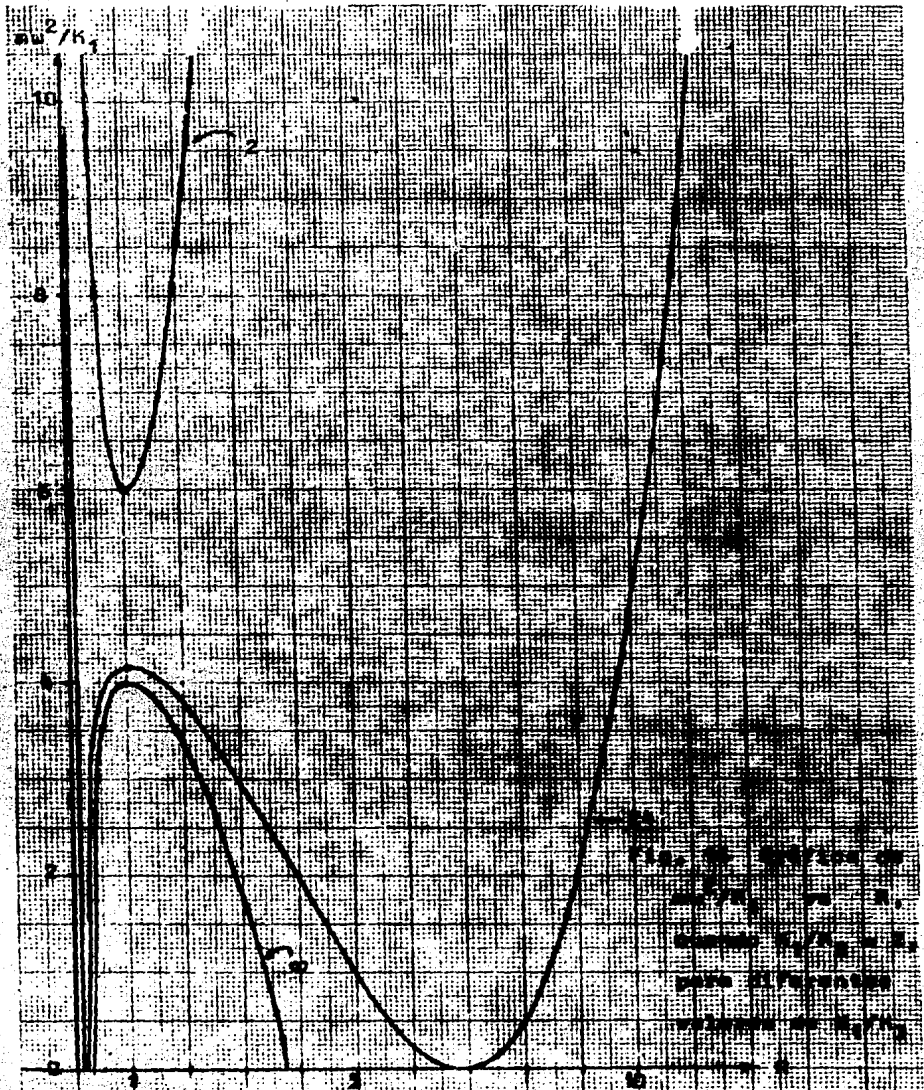


Fig. 1. Dependence of  
 $au^2/k_1$  on  $\alpha$   
 for  $\beta = 0.5$  and  $\gamma = 0.5$   
 with different values  
 of  $\delta$  and  $\epsilon$ .

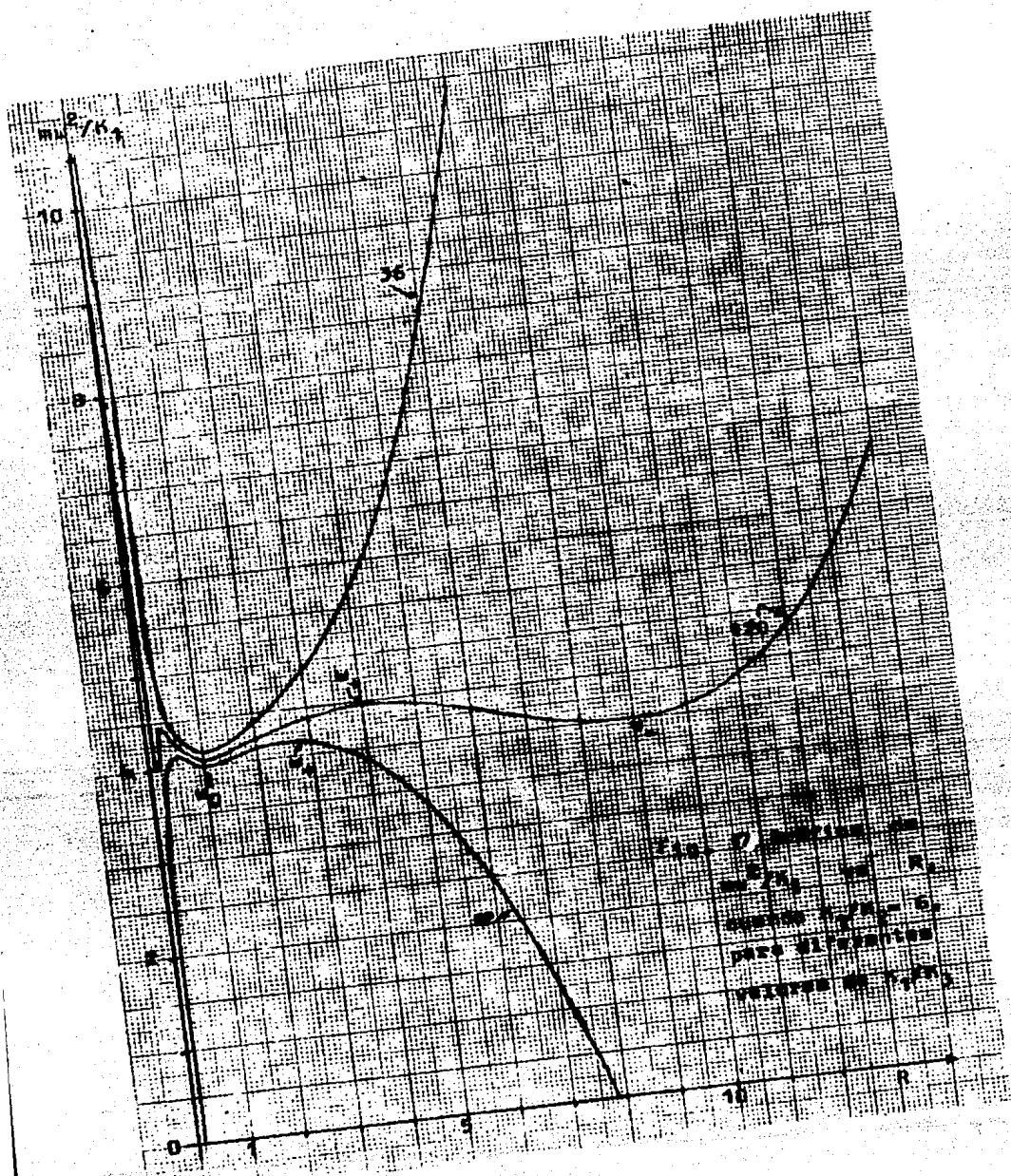


Fig. 7  
P. 1  
R. 1  
P. 2  
R. 2  
P. 3  
R. 3  
P. 4  
R. 4  
P. 5  
R. 5

C) VIBRACIONES AMORTIGUADAS TIPO 2

Otra forma de satisfacerse la ecuación (36), es cuando

$$K_3(4\text{Cos}^2\theta - 1)(R + R^{-1})^2 + 2K_2\text{Cos}\theta \cdot (R + R^{-1}) + K_1 - K_3(4\text{Cos}^2\theta - 1) = 0$$

la anterior ecuación es de segundo grado en Cos θ y es de cuarto grado en R. Aunque es de cuarto grado en R se puede resolver, ya que es de segundo grado para R + R<sup>-1</sup>. Obtenemos para ella

$$R+R^{-1} = \frac{-\frac{K_2}{K_1}\text{Cos}\theta \pm \sqrt{\left(\frac{K_2}{K_1}\text{Cos}\theta\right)^2 - \frac{K_3}{K_1}(4\text{Cos}^2\theta - 1)\left(1 - \frac{K_3}{K_1}(4\text{Cos}^2\theta - 1)\right)}}{\frac{K_3}{K_1}(4\text{Cos}^2\theta - 1)} \dots (40)$$

En (40) se aprecia que dado un valor de θ se puede obtener el correspondiente a R. Además, si se reemplaza θ por -θ la ecuación no se altera. Tampoco si se reemplaza R por R<sup>-1</sup>. Como R es un número positivo, la ecuación anterior restringe los valores de θ. Debido a la extensión de la expresión del lado derecho, se hace la siguiente definición

$$R + R^{-1} = f \dots (41)$$

con la definición (41) se puede determinar las siguientes equivalencias: R<sup>2</sup> + R<sup>-2</sup> = f<sup>2</sup> - 2 y R<sup>3</sup> + R<sup>-3</sup> = f<sup>3</sup> - 3f. Las cuales sustituidos en (36) dan

$$\begin{aligned} m\omega^2 = & K_1(2 - f\cos \theta) + K_2(2 - (f^2 - 2)\cos 2\theta) + \\ & + K_3(2 - (f^3 - 3f)\cos 3\theta) \dots (42) \end{aligned}$$

Esta ecuación, relaciona la frecuencia con la amplitud de la raíz característica, ya que  $f$  depende de  $\theta$ .

Las vibraciones de la red que pueden explicarse con los valores de las raíces características,  $Re^{i\theta}$  y  $Re^{-i\theta}$ , tienen un módulo de amortiguamiento diferente a la unidad. Por esta razón se agrandan o se atenuan a lo largo de la red. Estas vibraciones difieren de las amortiguadas tipo 1, en que el desplazamiento atómico no está descrito únicamente por una función exponencial sino que también ocupan la posición de la envolvente de una onda sinusoidal,  $CR^n \cos(n\theta + D)$ . En estas vibraciones dos átomos contiguos no tienen por qué desplazarse en sentidos contrarios. Debido a ello, les hemos llamado vibraciones amortiguadas tipo 2.

La ecuación (41) es una ecuación de segundo grado en  $R$ , se puede resolver, es equivalente a  $R^2 - fR + 1 = 0$ , sus soluciones son inversas multiplicativas. De donde la ecuación (41), para un valor de  $\theta$  que satisface (40) y con el requisito de que  $R > 0$ , incluye cuatro valores de las raíces características:  $Re^{i\theta}$ ,  $Re^{-i\theta}$ ,  $R^{-1}e^{i\theta}$  y  $R^{-1}e^{-i\theta}$ .

En la figura 18, se grafica  $m\omega^2/K_1$  vs  $\theta$ , para tres valores diferentes del cociente  $K_1/K_3$ . En ellas se utiliza  $K_1/K_2 = 6$ , se aprecia en el caso  $K_1/K_3 = 36$  que el intervalo de validez del argumento de la raíz característica es de  $\pi/3$  a un valor un poco mayor a  $2\pi/3$ . Incluso hay unos muy redu-

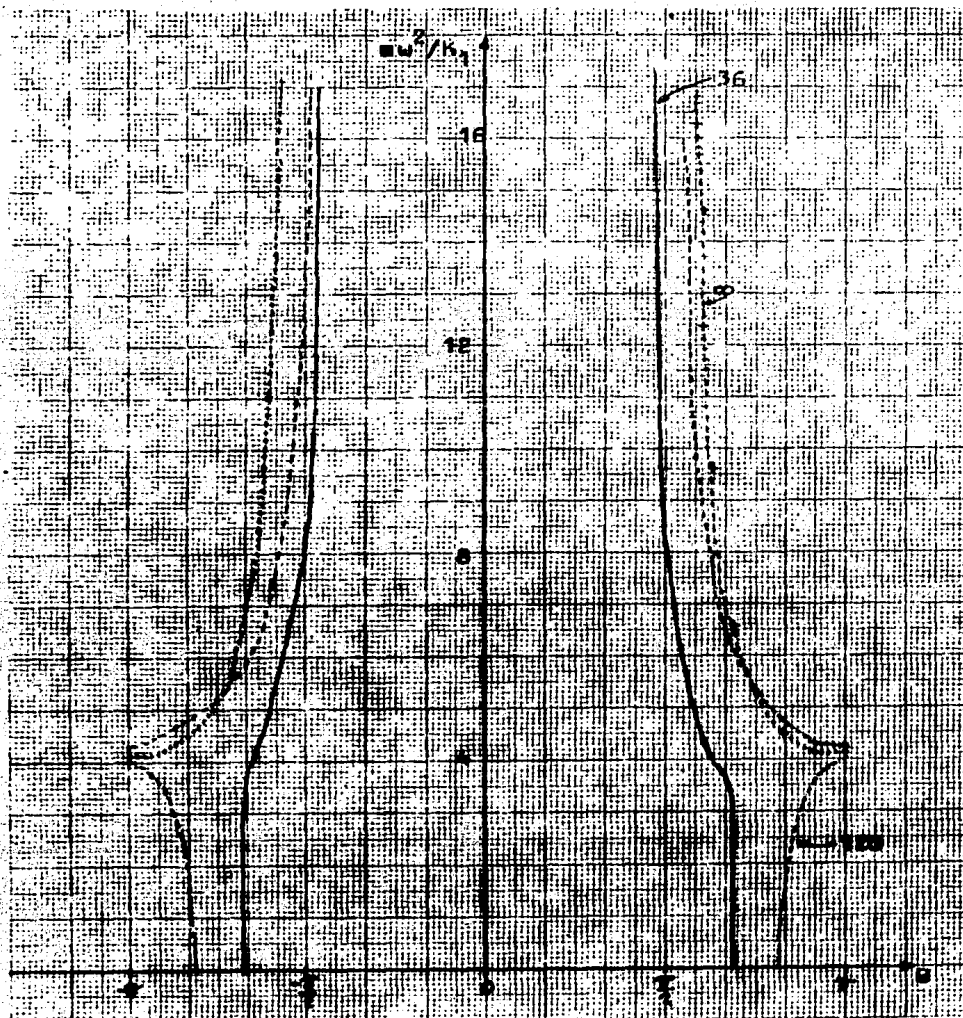


Fig. 18 Gráfica de  $m\omega^2/K_1$  vs  $\theta$ , cuando  $K_1/K_2 = 6$ , para diferentes valores de  $K_1/K_3$ .

cidos, que no permiten apreciar con claridad la relación entre la frecuencia y el argumento, como sucede cuando  $K_1/K_2 < 4$ . En esta misma figura, la gráfica punteada representa el caso  $K_1/K_3$  igual a 120 y se compone de cuatro partes, dos en el valor positivo de  $\theta$  y dos en el valor negativo. Para dicha gráfica hay una región de la frecuencia que no está relacionada con  $\theta$ , lo cual significa que ahí las vibraciones atómicas son una combinación lineal de ondas sinusoidales o de vibraciones amortiguadas tipo 1. Hemos en este capítulo mostrado la relación que existe entre la frecuencia y las raíces características, lo que nos ha permitido también hablar de las formas diferentes de vibración que aparecen en este tipo de red. Ahora seguiremos al siguiente con la finalidad de presentar algunas gráficas de las formas de vibrar de este sistema.

## CAPITULO IV. REPRESENTACION GRAFICA DE ALGUNAS DE LAS VIBRACIONES.

En nuestro sistema de masas con interacciones a primeros, segundos y terceros vecinos el desplazamiento de cada átomo alrededor de su posición de equilibrio, es un movimiento armónico.

El desplazamiento máximo está dado por la solución obtenida antes  $U_n$ . Los desplazamientos de los átomos no son independientes. La energía de un átomo está relacionada con su desplazamiento, esto permite considerar una condición en el desplazamiento atómico, la no divergencia, para así, evitar la divergencia en la energía. Con esta condición en principio se pensaría en eliminar todos los términos divergentes de la solución  $U_n$ , en sistemas infinitos quedando únicamente como posibles vibraciones las sinusoidales. Sin embargo, es posible explicar vibraciones a partir de los términos que crecen de  $U_n$ , en sistemas finitos o en sistemas en donde se han incluido imperfecciones.

En este capítulo, se muestran en forma gráfica algunos de los posibles movimientos vibracionales en una red monoatómica. La mayoría de ellos, se presentan en la red infinita. Aquí no demostramos cuando un tipo de vibración se satisface o cuando no, sólo se indican esas vibraciones como posibles. La variedad de movimientos vibracionales en este sistema es mucha de manera que aquí sólo se presentarán algunos de ellos para tener una visión un poco más clara del tipo de movimientos que puede presentar este sistema; por ejemplo, cuando en la red monoatómica con

interacciones a primeros, segundos y terceros vecinos, la solución contiene seis constantes arbitrarias. Un caso puede ser - digamos cuando las constantes de interacción satisfacen la desigualdad  $K_1/K_3 > 3 + (K_2/K_3)^2/3$ , o sea que estamos considerando las constantes de la región I, y con frecuencias mayores a  $\omega_0$ .

Según las ecuaciones (26), la solución correspondiente es  $U_n = C_1 E_1^n + D_1 E_1^{-n} + C_2 R^n \cos(n\theta_2 + D_2) + C_3 R^{-n} \cos(n\theta_2 + D_3)$ . Para comenzar la descripción vamos a considerar únicamente las vibraciones amortiguadas tipo 1, en este caso se tendrá  $C_2 = C_3 = 0$ , entonces parte de la solución general es  $U_n = C_1 E_1^n + D_1 E_1^{-n}$ .

Los dos términos considerados en esta solución divergen al considerar el sistema infinito. En las figuras que se mostrarán en este capítulo, se hará la gráfica de  $U_n$  vs  $n$ , las cuales podrían dar una falsa idea del movimiento vibratorio al interpretarlos como movimientos transversales, esto no es así, ya que los movimientos son longitudinales; a lo largo de  $n$ .

En la fig. 19, se grafica el comportamiento de los desplazamientos atómicos cuando su movimiento se explica mediante una sola onda sinusoidal,  $U_n = C_1 \cos(n\theta_1 + D_1)$ . Los valores físicos considerados en ella son  $K_1/K_3 = 144$ ,  $K_2/K_3 = 12$  y  $m\omega^2/K_1 = 0.5$ . En esta gráfica, se puede apreciar el valor de la longitud de onda en aproximadamente cada diez distancias interatómicas; o sea, aproximadamente cada diez átomos los desplazamientos se repiten en su valor. La frecuencia  $\omega$  de cada átomo es igual a la de los otros, significando que los átomos pasan al mismo tiempo de un desplazamiento positivo a uno negativo o de uno negativo a uno positivo, según el desplazamiento que le corresponda mediante la onda sinusoidal. En este tipo



de onda el que la mayoría de los autores ha considerado como único movimiento de la red infinita monoatómica. Cuando se considera la interacción al primer vecino esto es correcto, pero no cuando tenemos la interacción a mayores alcances.

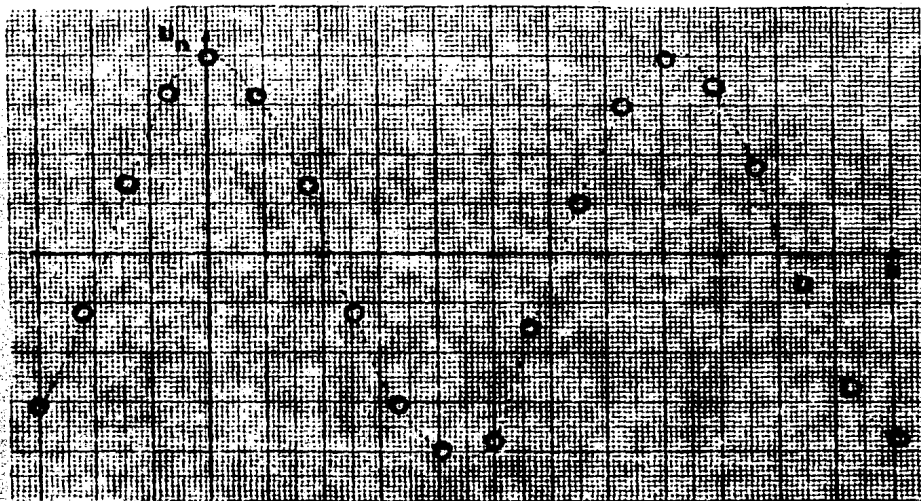


Fig. 19 Vibración sinusoidal

En la fig. 20, se utilizan los mismos valores de los cocientes entre las constantes de interacción de la gráfica anterior y  $\mu^2/K_1 = 4.2$ . De la solución completa ahora solo se utiliza la de las vibraciones amortiguadas tipo 1, o sea  $U_n = C_1 E_1^n + D_1 E_1^{-n}$ . Como se aprecia en la gráfica, los desplazamientos presentan simetría con respecto al eje,  $U_n = U_{-n}$ .

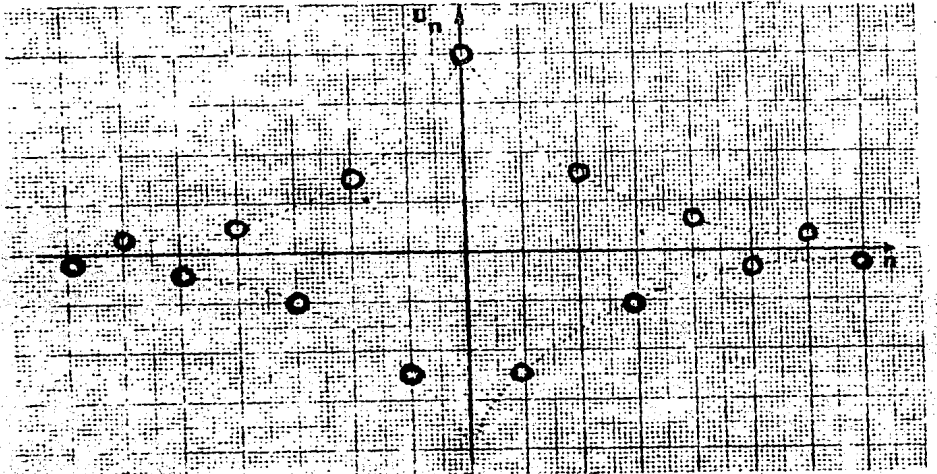


Fig. 20 Vibraciones amortiguadas tipo 1

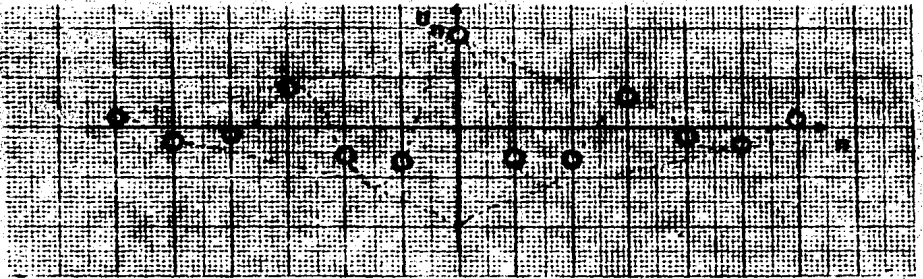


Fig. 21 Vibración amortiguada tipo 2

En la fig. 21, se muestra una vibración amortiguada del tipo 2, la cual es consecuencia de los valores complejos de módulo no unitario de la raíz característica (son 4). En ella se aprecia que los átomos ocupan la posición de una onda sinusoidal y esta se amortigua hacia los "extremos" de la red infinita,  $U_n = C_2 R^n \text{Cos}(n\theta_2 + D_2) + C_3 R^{-n} \text{Cos}(n\theta_2 + D_3)$  con los valores  $K_2/K_3 = 6$ ,  $K_1/K_3 = 12$  y  $m\omega^2/K_1 = 4.6$ . En dicha gráfica se utilizó otra consideración, la simetría de la solución  $U_n = U_{-n}$ . Este tipo de comportamiento puede contener como caso particular a las vibraciones amortiguadas del tipo 1 al considerar la longitud de onda de la onda sinusoidal de dos distancias interatómicas. Pero se hace la distinción, ya que en la interacción al primer vecino únicamente son posibles las vibraciones sinusoidales y las amortiguadas del tipo 1, como ha sido ampliamente demostrado [4]. Además, de que el espectro de frecuencias para cada uno de estos casos tiene un comportamiento diferente.

En una red semi-infinita, estos tipos de vibración son posibles, la solución consistiría únicamente de los sumandos no divergentes, quedando los desplazamientos más amplios en la superficie o cerca de ella y conforme los átomos están más lejanos a la superficie sus desplazamientos se atenúan.

Teniendo en mente que la solución completa admite la superposición de dos o tres vibraciones como las mostradas anteriormente, ahora se mostrarán algunas de estas vibraciones. Esto hace que los desplazamientos atómicos sean más variados que los reportados en la literatura [3], [9]. En el problema con interacción a primeros y segundos vecinos, los desplazamientos

atómicos se explican mediante los tres tipos de vibración que se obtienen en nuestro caso también, aceptándose entonces aquí una vez más superposiciones de algunas de ellas: sinusoidal+sinusoidal, sinusoidal+amortiguada tipo 1 y amortiguada tipo 1 + amortiguada tipo 1 [13].

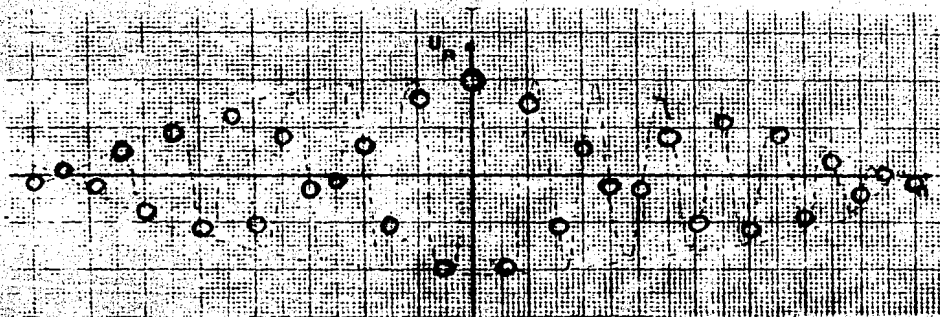


Fig. 22 Vibración sinusoidal+ Vibración sinusoidal

En la fig. 22, se muestra una posible vibración al considerar dos trenes de onda sinusoidales y con la misma amplitud, o sea  $U_n = C_1 \text{Cos}(n\omega_1 + D_1) + C_2 \text{Cos}(n\omega_2 + D_2)$  cuando  $K_1/K_3 = 21$ ,  $K_2/K_3 = 73$  y  $m\omega^2/K_1 = 4.0569\sqrt{}$ ; tomándose  $C_1 = C_2$  y las diferencias de fase iguales a cero. Ambos trenes de onda tienen la misma frecuencia pero su número de onda es diferente, originando una propagación de los desplazamientos atómicos como los pulsos. La diferencia de estos con los de una sola onda sinusoidal es que los máximos desplazamientos atómicos no pertenecen a la misma envolvente, sino que ahora los desplazamientos están sobre una onda y esta está contenida en una envolvente sinusoidal. Este tipo de vibración, antes de la técnica de los

operadores para las ecuaciones de diferencias finitas, no se habían visualizado para la red infinita monoatómica, ya que siempre se proponía como solución de la red una sola onda sinusoidal, aun cuando se consideraran interacciones a segundos o mas vecinos.

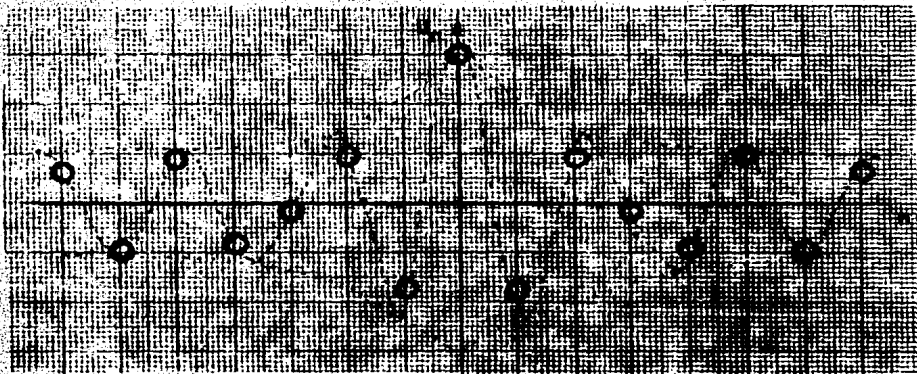


Fig. 23 Vibración sinusoidal+ vibración amortiguada tipo 1

En la figura 23, se muestra una de las formas de comportamiento de los átomos cuando su vibración es consecuencia de una onda sinusoidal y una del tipo amortiguado 1;  $U_n = C_2 \cos(nD_2 + D_2) + C_3 E_3 + D_3 E_3^{-n}$  para  $K_1/K_3 = 19$ ,  $K_2/K_3 = 7$  y  $mu^2/K_1 = 4.203$ . En esta vibración se presentan dos desplazamientos que disminuyen conforme los átomos están mas lejanos del centro y cada vez mas, son muy parecidos a una vibración sinusoidal. Esta gráfica se realizó al considerar  $C_2 = 2C_3 = 2D_3$ . Si se considera  $C_3 = D_3 = -C_2$ , el átomo del centro tiene un desplazamiento nulo y al alejarse de él los desplazamientos van aumentando de valor pareciéndose cada vez más a una onda sinusoidal.

Se pueden superponer dos vibraciones amortiguadas del tipo 1 y se logra un modo que se expanda o se acorte. En todas las figuras anteriores por facilidad solo se han graficado vibraciones simétricas,  $U_n = U_{-n}$ .

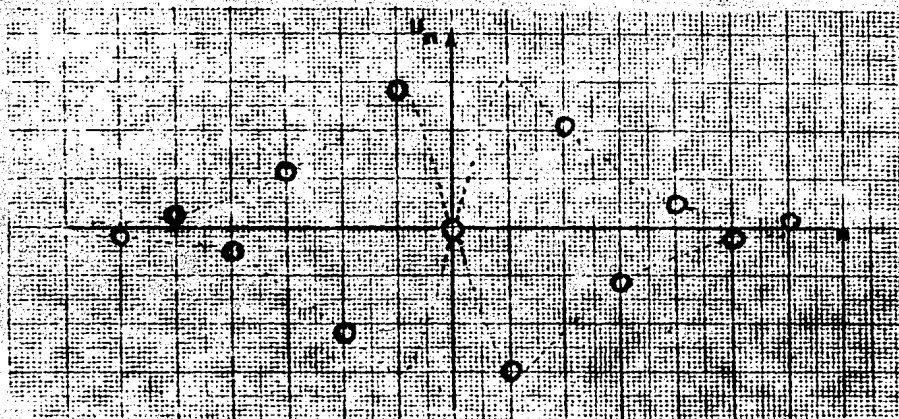


Fig. 24 Vibración amortiguada tipo 1 + amortiguada tipo 1

En la figura 24, se muestra un posible modo de vibración en la red cuando hay anti-simetría en la solución,  $U_n = -U_{-n}$ . En este se consideró  $U_n = C_2 E_2^n + D_2 E_2^{-n} + C_3 E_3^n + D_3 E_3^{-n}$  cuando  $K_1/K_3 = 50$ ,  $K_2/K_3 = 12$  y  $mw^2/K_1 = 4.2$  y además  $C_2 = D_3 = -C_3 = -D_2$ .

El objeto de incluir aquí estas seis vibraciones es dar una idea de la gran variedad de los desplazamientos atómicos que pueden presentarse en la red monoatómica con interacción a primeros, segundos y terceros vecinos. Estos pueden ser aún más complicados, ya que no se han considerado vibracio-

nes con la solución completa. Algunos de ellos no se aprecian muy bien, pero si se puede dar una idea de ellos.

Cuando la solución completa acepta dos raíces complejas de módulo uno y cuatro de módulo diferente a la unidad, esto representa la superposición de una onda sinusoidal con una amortiguada tipo 2. Siendo los desplazamientos atómicos muy parecidos a los sinusoidales+amortiguados tipo 1, solo que en la región central se produce un pulso.

Al superponer una vibración amortiguada tipo 1 con una del tipo 2, se obtiene otro parecido al del tipo 2 o bien uno que introduzca dos modos localizados, uno de cada lado del medio dispersivo. Esto es muy parecido también cuando se superponen tres del tipo 1, aunque existe una mayor variedad debido a la intervención de un mayor número de constantes arbitrarias como factor de los sumandos.

Un caso interesante es cuando surgen en la solución cuatro raíces complejas de módulo uno y dos raíces reales negativas. Las raíces complejas describen dos trenes de onda diferentes dando desplazamientos tipo pulso, al combinarlo con una vibración amortiguada tipo 1, se obtiene un pulso que sobreesale en tamaño comparado con los del "extremo" de la red, originando así un pulso semi-localizado.

## CONCLUSIONES

La red monoatómica con interacciones a primeros, segundos y terceros vecinos, en un estudio semi-clásico, origina una ecuación de diferencias de sexto orden. Aunque el orden de la ecuación es muy alto, dicha ecuación se resuelve analíticamente, para ello se aprovecha la simetría que presenta la ecuación. Así mismo, analíticamente se pueden determinar los rangos de las constantes físicas: masa atómica, constantes de interacción y la frecuencia de vibración; para los cuales la solución tiene comportamientos diferentes.

Las vibraciones en nuestra red monoatómica se explican con los mismos tres tipos de vibración básicos obtenidos en las redes que incluyen interacción a primeros y segundos vecinos solamente: vibración sinusoidal, vibración amortiguada tipo 1 y vibración amortiguada tipo 2. Solo que, cuando se añade la interacción al tercer vecino es posible tener una mayor combinación de dichas vibraciones básicas.



## BIBLIOGRAFIA

- [1] L. Brillouin. "Wave Propagation In Periodic Structures".  
Mc. Graw Hill Bo. Co. Dover (1946)
- [2] M. Born and Th. Von Karman., Phys. Z. 13, 297 (1912);  
M. Born. Proc. Phys. Soc. (London) 54, 362 (1942);  
J. P. McKelvey. "Física Del Estado Sólido y de semiconduc-  
tores". Limusa, México (1976).
- [3] L. Andrade. Reporte Interno FACUNAM 1976. No publicado.  
Ver también la bibliografía contenida en este artículo
- [4] L. Andrade. No publicado.
- [5] L. Andrade. Reporte Interno FACUNAM 1980. No publicado;  
A. Aldana, S. Orozco y L. Andrade. Bol. Soc. Mex. Fis.  
no. 5, E19, (1984);  
A. Aldana y L. Andrade. Bol. Soc. Mex. Fis. no. 4, 54(1985);  
J. Borau y L. Andrade. Bol. Soc. Mex. Fis. no. 4, 145(1986).
- [6] J. Hory y T. Asahi. Progr. Theoret. Phys., 17, 523(1957).
- [7] Gaziz y Wallis. J. Math. Phys., 3, 190(1962).
- [8] M. Fukushima. Sci. Rep., 16, 1(1969).
- [9] L. Andrade. Proc. II, Int. Conf. "Recent Progress In Many-  
Body Theories". Lectures Notes In Physics.  
Springer-Verlag, 142, 309(1981).
- [10] L. Andrade. No publicado
- [11] L. E. Dickson, "New First Course In The Theory Of Equations"  
J. Wiley. New York (1957).
- [12] G. Boole. "Calculus Of Finite Differences".  
Chelsea Pu. Co. New York (1970).
- [13] L. Andrade. No publicado.