

INSTITUTO POLITECNICO NACIONAL

Escuela Superior de Física y Matemáticas

ESTUDIO DE VIBRACIONES EN CADENAS LINEALES
CON INTERACCIONES A SEGUNDOS VECINOS

TESIS

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE LICENCIADO
EN FISICA Y MATEMATICAS PRESENTA

JESUS ORTEGA CAMPOS

MEXICO

1971

A mis Padres

A la memoria de mis compañeros y amigos
accidentados el pasado 10 de noviembre de 1970.

Evodio I. López R.
Arturo López Pérez
J. Antonio Téllez Montiel

A mis hermanos y amigos

A G R A D E C I M I E N T O S

La gran cantidad de cálculos que nos sirvió para verificar y familiarizarnos con los resultados aportados en este trabajo fueron efectuados en diferentes centros de cálculo, el uso de tales facilidades es bastante agradecido, estos centros incluyen la IBM-1130 del Centro Nacional de Cálculo, la IBM-1130 con su sistema Calcomp Plotter del Instituto Mexicano del Petróleo, la PDP-10 de la Comisión Nacional de Energía Nuclear de Salazar, la CDC-3150 del Centro Nacional de Cálculo y la PDP-8 de la Escuela Superior de Física y Matemáticas del I.P.N.

Deseo agradecer sinceramente al Dr. Harold V. McIntosh, director de tesis y autor de algunas de las ideas originales que se presentan en la misma por su valiosa ayuda en la elaboración de este trabajo. También deseo agradecer la colaboración de la Srita. Martha Pohls Padilla por su valiosa ayuda en la mecanografía de esta tesis.

La mayor parte de esta investigación fue estimulada por el interés del Dr. Nicolás Cabrera en las propiedades superficiales de sólidos.

Tabla de contenidos

1	INTRODUCCIÓN	1
1.1	Objeto del presente trabajo	1
1.2	Generalidades del método empleado	1
2	FORMULACIÓN PARA LA CADENA UNIDIMENSIONAL CON INTERACCIONES A SEGUNDOS VECINOS.	3
2.1	Sistemas de ecuaciones de movimiento en forma matricial.	3
2.2	Eigenvalores λ (frecuencias de vibración).	5
2.3	Eigenvectores de la matriz de movimiento (modos normales).	6
2.4	Forma recursiva de la ecuación característica.	7
2.5	Matriz de transferencia.	8
2.6	Definición de los modos normales usando la matriz de transferencia.	9
2.7	Eigenvalores μ (números de onda) y eigenvectores de la matriz de transferencia (onda).	10
2.8	Ecuación característica para μ , propiedades de la matriz de transferencia.	13
2.9	Aplicación del teorema espectral a la matriz de transferencia.	17
2.10	Tercer problema de eigenvalores.	20
3	PROPIEDADES DE LA SIMETRÍA DE LA CADENA, Y DE MATRICES CUYOS EIGENVALORES OCURREN EN PAREJAS RECÍPROCAS.	21
3.1	Simetría del modelo.	21
3.2	Simetría local.	22
3.3	Los dos subespacios que surgen de la propiedad de los eigenvalores en parejas recíprocas.	25
3.4	Teorema acerca de las raíces en parejas recíprocas.	25
3.5	Logaritmo de la misma clase de matrices.	29
4	RELACIÓN DE DISPERSIÓN	31
4.1	Concepto de relación de dispersión en el presente modelo.	31
4.2	Selección de parámetros.	32
4.3	Teorema de Gerschgorin, condición mecánica y forma final de la relación de dispersión.	33
4.4	Análisis de la región compleja de la relación de dispersión.	42
4.5	Evaluación de $T^{(n)}$ y $x(\xi, y)$ usando parámetros.	46
4.6	Espectro de frecuencias en función de los polinómios de Tchebychev.	48

5	MODELO DEL ANILLO	57
5.1	Generalidades y condiciones a la frontera.	57
5.2	Matriz de movimiento y relación de dispersión.	58
5.3	Comparación de los resultados con el interior de una cadena y conclusiones. . .	61
6	MODELO CON EXTREMOS FIJOS	67
6.1	Consideraciones del modelo y gráfica del espectro de eigenfrecuencias.	67
6.2	Degeneración por cruzamiento.	69
6.3	Técnica empleada para graficar los modos normales de vibración (eigenvectores). .	72
6.4	Gráficas de los modos normales de vibración.	74
7	MODELO DE UNA CADENA CON LOS EXTREMOS LIBRES	77
7.1	Consideraciones del modelo, ecuaciones de movimiento.	77
7.2	Espectro de eigenfrecuencias.	78
7.3	Modos normales de vibración.	78
8	MODELO DE UNA CADENA DIATÓMICA	83
8.1	Forma del sistema inhomogéneo.	83
8.2	Matrices de movimiento y transferencia.	86
8.3	Relación de Dispersión.	88
8.4	Modos Normales de vibración.	95
9	MODELO DE UNA CADENA CON UN DEFECTO PUNTUAL EN UNA PARTÍCULA	99
9.1	Modificación de un elemento de la matriz de movimiento.	99
9.2	Espectro de frecuencias.	101
9.3	Modos normales de vibración.	102
9.4	Modificación de dos Partículas Interiores.	105
10	COMPARACIÓN ENTRE ALGUNOS DE LOS MODELOS ANALIZADOS.	107
10.1	Comparación entre el modelo cíclico y el de extremos libres.	107
10.2	Comparación entre el modelo cíclico y el de extremos fijos.	111
10.3	Comparación entre el modelo libre con el de fijos.	112
10.4	Análisis de los elementos de la matriz de movimiento en términos de matrices definidas.	113
11	RESUMEN Y CONCLUSIONES	119
A		123
B		127
C		131
D		135
E		141

F	145
G	147
Referencias	165

Capítulo 1

INTRODUCCIÓN

1.1 Objeto del presente trabajo

El conocimiento del efecto de superficies libres sobre los modos normales de vibración de una red, es útil para el estudio de efectos superficiales de cantidades que pueden ser experimentalmente medibles, como son: El calor específico, la conductividad eléctrica, etc.

Algunos de los estudios que se han efectuado para encontrar las relaciones de dispersión y los modos normales de vibración, han sido suponiendo soluciones periódicas para sus modelos; en este trabajo no usamos esa técnica sino una matricial que involucra el concepto de eigenvalor y eigenvector. Con esta técnica es posible investigar las relaciones de dispersión y los modos normales de vibración de una red unidimensional finita o semiinfinita, cuyas fronteras pueden estar libres o fijas; también nos permite analizar modelos que tengan más de un átomo por celda unitaria y las diferentes interacciones que puedan existir entre ellas. Esta técnica es ilustrada con la obtención de relaciones de dispersión y modos normales de vibración, para el interior de cualquier cadena, para una cadena con extremos fijos, para un anillo. Para el caso de una cadena con extremos libres, se obtuvo la relación numérica, también se analiza el caso de la cadena diatómica con interacciones a segundos vecinos.

1.2 Generalidades del método empleado

Para claridad en la presentación de la discusión completa, consideramos primero una cadena lineal unidimensional con sus extremos fijos, formada por partículas homogéneas equidistantes, por lo tanto el modelo que analizamos es del tipo de "Baden Powell".

Además nuestro modelo, es el de una cadena de partículas libres, es decir, un modelo en el que las únicas fuerzas presentes, son las debidas a la interacción entre las partículas mismas, las modificaciones y generalización serán indicadas posteriormente.

Los problemas realistas son aquellos que implican redes tridimensionales y aunque ellos exhiben algunos aspectos, tales como irregularidades en sus curvas de calores específicos que no son encontrados en sistemas unidimensionales, estos sistemas son muy complicados y muchas veces sus propiedades son inferidas, como simples y legítimas a partir de otros sistemas más sencillos, como por ejemplo cuando es posible separar sus ecuaciones de movimiento en términos de aquellos pertenecientes al sistema unidimensional. Por lo tanto uno de los

objetivos de este trabajo, es el de encontrar un modelo (matricial) que nos permita inferir algunas características de modelos más complicados.

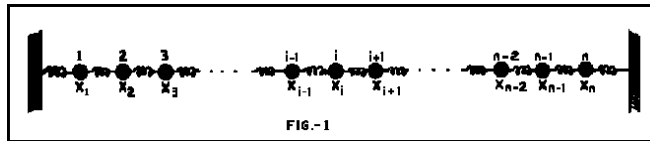
La referencia clásica de estos tratamientos es encontrada en el libro de Brillouin. “*Wave Propagation in Periodic Structures*” [1], en tanto que los tratamientos contemporáneos los podemos encontrar en el libro “*Theory of lattice dynamics in the harmonic approximation*”, [2] cuyos autores son Maradudin, Montrol y Weiss. El tratamiento intenso de la Escuela Japonesa está resumido en dos artículos [3] y [4] y en el libro de Hori [5]. Uno de los pocos artículos en que se trabajan interacciones a segundos vecinos y que fue muy importante en el desarrollo de este estudio fue publicado por Gazis y Wallis [6].

Capítulo 2

FORMULACIÓN PARA LA CADENA UNIDIMENSIONAL CON INTERACCIONES A SEGUNDOS VECINOS.

2.1 Sistemas de ecuaciones de movimiento en forma matricial.

Consideremos una cadena unidimensional monoatómica, formada por masas equidistantes m y constantes de resorte k , esto es:



En donde la serie: $1, 2, \dots, n$ nos denotará la colocación de las partículas y la serie: x_1, x_2, \dots, x_n nos denotará sus desplazamientos, relativos a su posición de equilibrio.

Por otra parte, los resortes que consideramos son elásticos, de tal forma que si x_i, x_{i+1} y x_{i+2} son los desplazamientos (que consideramos transversales) de las masas sucesivas, en sus posiciones de equilibrio, entonces la fuerza debida a interacciones a segundos vecinos, entre la partícula i -ésima y sus dos vecinas más próximas, por la derecha e izquierda es, aplicando la ley de Hooke.

$$f_i = k(x_{i+1} + x_{i-1} - 2x_i) + k'(x_{i+2} + x_{i-2} - 2x_i) \quad (2.1)$$

En donde k y k' son las constantes de fuerza asociadas con interacciones de fuerza central a primeros y segundos vecinos respectivamente.

La fuerza descrita por la ecuación (2.1), depende linealmente del desplazamiento relativo de las partículas, entonces si movemos todo el resorte, éste no producirá una fuerza del tipo que queremos analizar, pero si movemos las partículas relativas una a otra obtendremos una fuerza, por lo tanto analizaremos como por ejemplo, un desplazamiento en la partícula 1, va a producir una fuerza en la partícula 3, es claro que además existen otros tipos de fuerzas que no serán descritas por nuestras ecuaciones de movimiento, como son las debidas a un campo electrostático, estas fuerzas se involucran en un modelo mucho más realista como es el de polímeros y sólidos, también es claro que aunque es una hipótesis muy sencilla suponer que únicamente existen fuerzas debidas a interacciones entre las partículas, es adecuado para muchas aplicaciones.

Usando la segunda ley de Newton, tenemos que la fuerza actuando sobre la partícula i -ésima está dado por:

$$\sum_{i=1}^n f_i = m\ddot{x}_i \quad (2.2)$$

y que juntamente con la ecuación (2.1) resulta:

$$\ddot{x}_i = \frac{k}{m}(x_{i+1} + x_{i-1} - 2x_i) + \frac{k'}{m}(x_{i+2} + x_{i-2} - 2x_i) \quad (2.3)$$

De lo anterior podemos notar, que la distancia entre las partículas, es decir, la constante de la red no entra explícitamente en las ecuaciones (2.1) ya que su efecto está involucrado en las constantes de fuerza; por otra parte con esta ecuación es posible calcular las ecuaciones de movimiento de todas las partículas que se encuentren en el interior de la cadena; para las partículas de los extremos, las ecuaciones de movimiento están dadas por:

$$f_1 = m\ddot{x}_1 = k(x_2 - 2x_1) + k'(x_3 - 2x_1) \quad (2.4)$$

Para la partícula del extremo izquierdo

$$f_n = m\ddot{x}_n = k(x_{n-1} - 2x_n) + k'(x_{n-2} - 2x_n) \quad (2.5)$$

Para la partícula del extremo derecho. Es conveniente definir las siguientes cantidades:

$$a_1 = \frac{k}{m}; \quad a_2 = \frac{k'}{m} \quad \text{y} \quad a_0 = -2(a_1 + a_2)$$

Con lo cual las ecuaciones: (2.3), (2.4) y (2.5) se transforman en:

$$\ddot{x}_1 = a_0x_1 + a_1x_2 + a_2x_3 \quad (2.3')$$

$$\ddot{x}_i = a_0x_i + a_1x_{i+1} + a_2x_{i+2} + a_1x_{i-1} + a_2x_{i-2} \quad (2.4')$$

$$\ddot{x}_n = a_0x_n + a_1x_{n-1} + a_2x_{n-2} \quad (2.5')$$

Por lo tanto con este modelo físico, llegamos a un sistema de ecuaciones diferenciales que en forma matricial, lo podemos escribir como:

$$\frac{d^2}{dt^2} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_0 & a_1 & a_2 & \dots & & 0 \\ a_1 & a_0 & a_1 & a_2 & \dots & \\ a_2 & a_1 & a_0 & a_1 & a_2 & \\ \vdots & \vdots & & & & a_2 \\ \vdots & \vdots & & & & a_1 \\ 0 & & & a_2 & a_1 & a_0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \quad (2.6)$$

Por lo tanto vemos, que para este caso particular, las ecuaciones de movimiento dan lugar a un sistema de ecuaciones diferenciales, en donde la matriz de los coeficientes que resulta de forma pentagonal nos denotará la matriz de movimiento de la cadena. Matemáticamente el problema en resolver el sistema de ecuaciones diferenciales está involucrado en la matriz de movimiento, por lo cual se hace necesario dedicarle un estudio especial.

Es necesario mencionar que aunque en este momento, es nuestra intención discutir la formulación matemática para el interior de cualquier cadena, tenemos que emplear conceptos del caso de una cadena con extremos fijos Fig. 1, que puede ser considerada como el interior de una cadena, lo mismo que el modelo del anillo, que son algunos de los modelos que analizaremos posteriormente (Cap. 6 y Cap. 5 respectivamente).

2.2 Eigenvalores λ (frecuencias de vibración).

Para simplificar y solucionar, este sistema de ecuaciones diferenciales, denotemos la matriz de los coeficientes por M y al vector columna por x con lo cual resulta la forma simplificada siguiente:

$$\frac{d^2 x}{dt^2} = Mx \quad (2.7)$$

Como una de las formas de solucionar el sistema de ecuaciones compacto (2.7), consiste en diagonalizar nuestra matriz de movimiento M , lo cual se puede hacer, ya que toda matriz simétrica es diagonalizable y además tiene un conjunto ortogonal de eigenvectores; físicamente se debe confiar en este resultado, ya que es una consecuencia de la ley de Newton y de la homogeneidad simétrica de la cadena, por lo tanto calculamos.

$$U^{-1}MU = \Lambda \quad (2.8)$$

En donde U es una matriz tal que nos diagonaliza la matriz M , dando como resultado una matriz diagonal Λ , cuyos elementos son los eigenvalores de M y que físicamente nos representan las funciones características de las partículas llamadas también frecuencias de resonancia; además la matriz U tiene como columnas los eigenvectores de M , estos eigenvectores no son otra cosa que los modos normales de vibración de la cadena; como se justificará posteriormente.

Por lo tanto el paso siguiente, es diagonalizar la matriz de movimiento M , para lo cual multiplicamos la ecuación (2.7) por U^{-1} por la izquierda y el lado derecho por la matriz identidad en la forma $U^{-1}U$, esto es

$$U^{-1} \frac{d^2 x}{dt^2} = U^{-1}MU^{-1}Ux$$

Además como U es una matriz de coeficientes constantes, podemos multiplicar el vector de variables x por la matriz U esto es

$$\frac{d^2 U^{-1}x}{dt^2} = U^{-1}MU^{-1}Ux$$

definiendo $Y = U^{-1}x$ y tomando en cuenta que $U^{-1}U = UU^{-1}$ y además la ecuación (2.8) resulta

$$\frac{d^2 y}{dt^2} = \Lambda Y$$

De este sistema de ecuaciones, podemos separar una para la partícula i -ésima, esto es

$$\frac{d^2 y_i}{dt^2} = \lambda_i y_i \quad (2.9)$$

La solución de esta ecuación en términos de exponenciales complejas es muy conocida, esto es:

$$y_i = e^{\pm\sqrt{-\lambda_i} t}$$

Por este resultado, podemos decir, que la raíz cuadrada de los eigenvalores de la matriz M , son precisamente las frecuencias de resonancia; por lo tanto una solución completa implica una superposición de vibraciones de todas las frecuencias permitidas.

2.3 Eigenvectores de la matriz de movimiento (modos normales).

Ahora lo que nos interesa es encontrar una solución general al sistema de ecuaciones (2.7), para lo cual introducimos el concepto de eigenvector en la forma siguiente:

Supongamos que X es un vector arbitrario y que es eigenvector de la matriz M con lo cual llegamos al siguiente sistema de eigenvalores.

$$\frac{d^2 x}{dt^2} = MX = \lambda X \quad (2.10)$$

Por tratarse de una serie de osciladores armónicos, la hipótesis usada en esta técnica es análoga a la que se emplea en otros modelos que suponen soluciones del tipo periódico, esto es de la forma:

$$x_i = x_i(0)e^{i(\omega t - kn)}$$

Por lo tanto si el sistema de partículas es desplazado ligeramente del equilibrio y soltado, el sistema efectuará pequeñas oscilaciones alrededor del equilibrio con las frecuencias $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$; por lo tanto las soluciones de la matriz de movimiento son llamadas frecuencias de vibración libre o frecuencias de resonancia del sistema, pero nosotros las llamamos frecuencias características temporales, ya que nos dan la variación del movimiento por la unidad de tiempo. Por otra parte las componentes del eigenvector son llamadas, las coordenadas normales del sistema, además cada coordenada normal corresponde a una vibración del sistema involucrando únicamente una frecuencia y al conjunto de componentes de oscilación que forman el eigenvector se les conoce como modos normales de vibración; por lo tanto todas las partículas en cada modo vibran con la misma frecuencia y fase, además sus amplitudes relativas estarán determinadas por la matriz que diagonaliza a M es decir, la matriz cuyas columnas son los eigenvectores de la matriz de movimiento M .

Por lo tanto el completo movimiento del sistema, es construído, por la suma de los modos normales, con un factor de peso que nos da la amplitud y fase apropiadas.

De lo anterior, podemos decir que la base de esta técnica, consiste en la diagonalización de la matriz de movimiento; además esto nos permite encontrar un método recursivo que empleamos para determinar los eigenvalores y eigenvectores.

2.4 Forma recursiva de la ecuación característica.

Debido a que el modelo da lugar a una restricción para los elementos de la matriz M , ya que las bandas diagonales son truncadas por las condiciones a la frontera de la cadena, es conveniente introducir coordenadas auxiliares ficticias a las cuales se les impone la condición de que sus desplazamientos sean siempre cero, físicamente equivale a que estén en reposo; para el caso que estamos tratando de interacciones a segundos vecinos, tenemos que suponer dos partículas ficticias en cada extremo, o sea las condiciones suplementarias también llamadas condiciones a la frontera son:

$$\begin{aligned} x_{n+2} &= 0 \\ x_{n+1} &= 0 && \text{Extremo derecho} \\ \\ x_0 &= 0 \\ x_{-1} &= 0 && \text{Extremo izquierdo} \end{aligned} \tag{2.11}$$

Como las ecuaciones (2.3') y (2.5') tienen la misma apariencia de (2.4'), entonces podemos escribir (2.4') empleando la ecuación (2.10) en la forma de una relación de recurrencia, esto es:

$$\frac{d^2 x_i}{dt^2} = \lambda x_i = a_1 x_{i+1} + a_2 x_{i+2} + a_1 x_{i-1} + a_2 x_{i-2} + a_0 x_i .$$

Que es conveniente ponerlo en la forma siguiente:

$$x_{i+2} = -\frac{a_1}{a_2} x_{i+1} + \frac{\lambda - a_0}{a_2} x_i + \frac{a_1}{a_2} x_{i-1} + x_{i-2}$$

y que junto con el siguiente sistema de ecuaciones redundantes:

$$\begin{aligned} x_{i+1} &= x_{i+1} \\ x_i &= x_i \\ x_{i-2} &= x_{i-2} \end{aligned}$$

nos permite construir el sistema matricial de recurrencia siguiente:

$$\begin{bmatrix} x_{i+2} \\ x_{i+1} \\ x_i \\ x_{i-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{a_1}{a_2} & \frac{\lambda - a_0}{a_2} & -\frac{a_1}{a_2} & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{i+1} \\ x_i \\ x_{i-1} \\ x_{i-2} \end{bmatrix} \tag{2.12}$$

Con el objeto de simplificar el álgebra introduzcamos la siguiente notación

$$T = \begin{bmatrix} \alpha & \beta & \gamma & \delta \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad \text{y} \quad Z_i = \begin{bmatrix} x_{i+2} \\ x_{i+1} \\ x_i \\ x_{i-1} \end{bmatrix}$$

En donde al mismo tiempo, hemos definido:

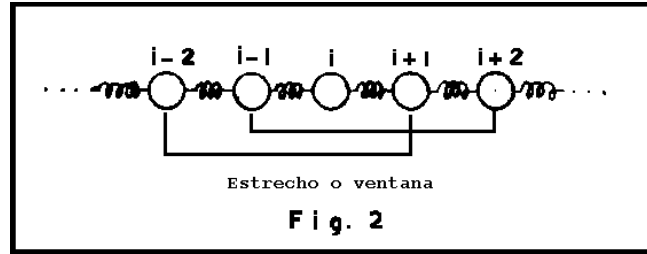
$$\alpha = \gamma = -\frac{a_1}{a_2} \quad , \quad \beta = \frac{\lambda - a_0}{a_2} \quad \text{y} \quad \delta = -1 \tag{2.13}$$

2.5 Matriz de transferencia.

Con estas definiciones, el sistema (2.12) se reduce a la forma compacta siguiente:

$$Z_i = TZ_{i-1} \quad (2.14)$$

Es precisamente esta matriz de coeficientes, la que es llamada matriz de transferencia [7], ya que nos permite estudiar la variación en el espacio de un segmento, formado por un grupo determinado de partículas, en términos de otro similar, es decir, para el caso que estamos tratando de interacciones a segundos vecinos, podemos estudiar un segmento formado por cuatro desplazamientos que empiezan en la partícula $i+2$ en términos de un segmento similar que empieza desde la partícula $i+1$ gráficamente.



Desarrollando para algunas i 's en la ecuación (2.14) tenemos:

$$\begin{aligned} \text{Si } i = 1 & \quad \text{entonces} \quad Z_1 = TZ_0 \\ \text{Si } i = 2 & \quad \text{entonces} \quad Z_2 = TZ_1 = T^2 Z_0 \\ & \quad \dots \\ \text{Si } i = n & \quad \text{entonces} \quad Z_n = T^n Z_0 \end{aligned} \quad (2.15)$$

En donde

$$Z_0 = \begin{bmatrix} x_2 \\ x_1 \\ x_0 \\ x_{-1} \end{bmatrix} \quad \text{y} \quad Z_n = \begin{bmatrix} x_{n+2} \\ x_{n+1} \\ x_n \\ x_{n-1} \end{bmatrix}$$

Es importante hacer notar que el índice de la matriz de transferencia se refiere al número de veces en que la matriz o matrices de transferencia son multiplicados, es decir, para el caso de una cadena homogénea, como la que estamos tratando, todas las matrices son iguales en cuyo caso se puede hablar del índice como un exponente, pero si nuestra matriz no es homogénea, es decir, por ejemplo que una de sus partículas sea distinta a las demás, o un resorte sea distinto, entonces la matriz de transferencia correspondiente al bloque de cuatro partículas será distinta a las demás, en cuyo caso no se puede tratar el índice de la matriz de transferencia como exponente, también es importante mencionar que en esta formulación matemática trataremos únicamente con cadenas homogéneas; las cadenas no-homogéneas serán tratadas posteriormente, como se había mencionado con anterioridad y en esos casos trataremos las formas particulares de las matrices de transferencia.

Analizando estos dos vectores, vemos que necesariamente tenemos que suponer dos partículas ficticias en cada extremo de la cadena, ya que estamos suponiendo que las partículas, inicial

y final interaccionan a segundos vecinos; por lo tanto con esto podemos justificar la suposición de las condiciones a la frontera introducidas con anterioridad.

Podemos ver algunas propiedades, que resultan de la relación $Z_n = T^n Z_0$ en primer lugar esa ecuación se obtuvo suponiendo, un segmento de cuatro partículas sucesivas distinto de cero; pero ahora supongamos que cuatro partículas adyacentes son cero y reescribamos la ecuación de recurrencia (2.14) en la forma siguiente:

$$T^{-n} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ x_n \\ x_{n-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_2 \\ x_1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

En donde hemos introducido las condiciones a la frontera y el hecho de que $|T| \neq 0$. Si para que se cumpla nuestra hipótesis, suponemos que x_1 y x_2 son cero, entonces como $T^{-n} \neq 0$, esto implica que:

$$\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ x_n \\ x_{n-1} \end{bmatrix} = 0$$

y por lo tanto que $x_n = 0$, lo cual quiere decir que todas las componentes del vector son cero y como el eigenvector cero no lo consideramos como eigenvector, podemos concluir que es imposible que el bloque formado por cuatro partículas adyacentes sea cero, sin que el desplazamiento de cada una sea cero; para nuestro caso podemos suponer que x_1 y x_2 son distintas de cero, ya que si ambos fueran cero obtendríamos un vector con componentes cero, debido a que x_0 y x_{-1} son cero por las condiciones suplementarias.

2.6 Definición de los modos normales usando la matriz de transferencia.

Otra cosa importante que se puede ver del sistema de ecuaciones (2.14) es, que es precisamente el sistema que nos permite calcular los eigenvalores; además la matriz $T^{(n)}$ la podemos poner en una forma tal que sus elementos sean polinomios de λ , esto se puede comprobar por multiplicaciones sucesivas de T , por lo tanto podemos suponer que la matriz $T^{(n)}$ tiene la forma siguiente:

$$T^{(n)} = \begin{bmatrix} q_{11}(\lambda) & q_{12}(\lambda) & q_{13}(\lambda) & q_{14}(\lambda) \\ q_{21}(\lambda) & q_{22}(\lambda) & q_{23}(\lambda) & q_{24}(\lambda) \\ q_{31}(\lambda) & q_{32}(\lambda) & q_{33}(\lambda) & q_{34}(\lambda) \\ q_{41}(\lambda) & q_{42}(\lambda) & q_{43}(\lambda) & q_{44}(\lambda) \end{bmatrix} \quad (2.16)$$

Si sustituímos esta matriz en la ecuación (2.15) junto con las condiciones a la frontera, resulta el sistema homogéneo siguiente:

$$\begin{aligned} 0 &= x_2 q_{11}(\lambda) + x_1 q_{12}(\lambda) \\ 0 &= x_2 q_{21}(\lambda) + x_1 q_{22}(\lambda) \end{aligned} \quad (2.17)$$

Pero como es posible que de entre dos elementos distintos de cero resulte una ecuación con ceros, este resultado es bien conocido ya que una ecuación homogénea únicamente tiene

una solución no trivial cuando el determinante de sus coeficientes es igual a cero, esto es:

$$(T^n)_{11} = \begin{vmatrix} q_{11}(\lambda) & q_{12}(\lambda) \\ q_{21}(\lambda) & q_{22}(\lambda) \end{vmatrix} = 0 \quad (2.18)$$

Evidentemente los desplazamientos x_1 y x_2 forman un eigenvector de la submatriz y pertenecen al eigenvalor cero, lo cual nos determina la razón entre los primeros desplazamientos ya que los demás se analizan por aplicaciones de T .

Ahora como T^n está definido como el producto de toda las T 's de tal forma de que corresponda a la sucesión de las partículas en la cadena, para el caso que estamos tratando de una cadena uniforme, el problema se simplifica, ya que todas las matrices T son iguales.

2.7 Eigenvalores μ (números de onda) y eigenvectores de la matriz de transferencia (onda).

De tal forma de encontrar la n -ésima potencia de T es conveniente introducir sus propios eigenvalores y eigenvectores, para lo cual construimos el segundo problema de eigenvalores, esto es:

$$TZ = \mu Z \quad (2.19)$$

Analizando esta ecuación, vemos que cuando una ventana de cuatro desplazamientos es descompuesta por medio de los eigenvectores de T , entonces cada componente es multiplicada por el factor μ al pasar de una partícula a la otra, esto nos permite observar el comportamiento de un grupo de partículas sin tener que observar toda la cadena, que es un resultado importante que emplearemos posteriormente, con esta idea sabremos cual es el número de coordenadas (que en este caso será mínimo) relacionado por una ecuación sencilla. Desde el punto de vista ondulatorio, analizamos una ventana de la cadena, en donde no interpretamos el eigenvector como en el de la matriz de movimiento, sino como una suma de cuatro vectores, que son precisamente componentes con respecto a los eigenvectores de la matriz original, por lo tanto es fácil de resolver estos desplazamientos locales, que podemos identificar como una onda y tratar el análisis de la cadena como la superposición de estas ondas primitivas. Por lo tanto la interpretación que se le da a los eigenvectores de T es que ellos definen la descomposición de los desplazamientos de las partículas dentro de las ondas, donde la propagación consiste en el multiplicador μ ; es decir, que las ondas parciales, que son las que se observan en nuestro caso, son multiplicadas por un factor cuando se corre la ventana, por lo tanto el análisis es más sencillo que el que se emplearía con corrimientos cíclicos y combinaciones lineales, se puede decir que $x_{i+1} = \mu x_i$, si cada componente tiene amplitud relativa determinada por las componentes de un eigenvector, además como μ puede resultar real, complejo o imaginario puro, de valor absoluto uno, o distinto, es posible distinguir la propagación de las oscilaciones, sus amortiguamientos o crecimientos.

Es conveniente introducir el logaritmo de μ , esto es:

$$\ln \mu = \phi \quad (2.20)$$

Con lo cual es definido el número de onda, de la onda Z , que no es otra cosa que la frecuencia espacial, ya que nos da la variación por unidad de distancia.

Existen principalmente cuatro casos para μ , que es necesario distinguir de (2.20), tenemos:

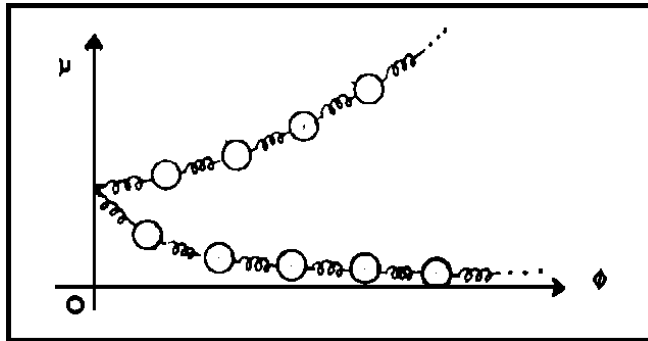
1. Si ϕ es real $\rightarrow \mu$ real, positivo o negativo
2. Si ϕ es imaginario $\rightarrow |\mu| = 1$
3. Si $\phi = \text{real} + i\pi \rightarrow \mu < 0$
4. Si ϕ es complejo $\rightarrow \mu$ complejo

Descripción en términos de ondas:

Primer caso. Como $\ln \mu = \phi \rightarrow e^\phi = \mu$, por lo tanto el comportamiento de la cadena corresponderá a una exponencial creciente o decreciente dependiendo de que $\mu > 1$, ó $\mu < 1$, esto es:

- Si ϕ es real y positivo, entonces $e^\phi > 1 \rightarrow \mu > 1$.
 Si ϕ es real y negativo, entonces $e^{-\phi} = 1/e^\phi < 1 \rightarrow \mu < 1$.

Gráficamente tenemos:



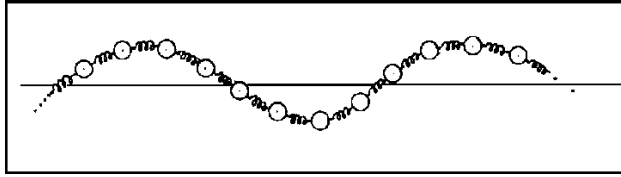
Este resultado gráfico, puede verse también en la siguiente forma sabemos que $x_{i+1} = \mu x_i$, además si $\mu > 0$, y como los desplazamientos los estamos considerando positivos, resulta que $x_{i+1} > 0$ de la misma forma $x_{i+2} = \mu x_{i+1} \rightarrow x_{i+2} > 0$ y en general tenemos que $x_1 > 0, x_2 > 0, \dots, x_n > 0$. Por lo tanto las partículas en la cadena tenderán a un desplazamiento exponencial homogéneo ya que además cada partícula va multiplicada por un factor (μ), que hace que aumente su valor con respecto a lo anterior. El caso en que $\mu < 0$ es exactamente el mismo, excepto que las partículas van a ir multiplicadas, por menos el mismo factor (esto es μ).

Segundo Caso. Si ϕ imaginario, por ejemplo $\phi = i\beta \rightarrow \mu = e^{i\beta} = \cos \beta + i \text{sen} \beta$ por lo tanto el comportamiento de la cadena, corresponderá a un coseno o seno, con lo cual el movimiento de la cadena será del tipo ondulatorio, además si sacamos el módulo de μ , esto es:

$$|e^{i\beta}| = |\mu| = (\cos^2 \beta + \text{sen}^2 \beta) = 1$$

Por lo tanto en este caso multiplicamos por un factor con valor absoluto "1", pero existirá un cambio de fase, aún cuando la amplitud se conserve constante, y es cuando generalmente se dice que existe movimiento ondulatorio. Por otra parte para problemas físicos del tipo que

estamos analizando, las raíces de los polinomios característicos que se obtienen, se suceden en parejas recíprocas (como se demostrará más adelante), por lo tanto si una raíz es compleja entonces existirá su conjugada, por lo cual es necesario considerar que: $\phi = \pm i\beta$ con lo que se obtiene $\mu = 2\sqrt{1 - \text{sen}^2\beta}$, por lo tanto el comportamiento de la cadena es ondulatorio, la gráfica que podemos considerar acorde con los datos anteriores será:



Tercer Caso. Si $\phi = \alpha + i\pi$, con α real resulta:

$$\mu = e^{\alpha+i\pi} = e^{\alpha}e^{i\pi} = -e^{\alpha}$$

Por este resultado vemos que se multiplica por un factor, el cual produce un cambio de signo, es decir, un desfase de 180° , por lo tanto se observarán oscilaciones con inversiones de fase; además el comportamiento de las partículas alternantes es el mismo, podemos pensar que las partículas que interaccionan a segundos vecinos tienen un comportamiento similar esto lo podemos ver de la siguiente forma:

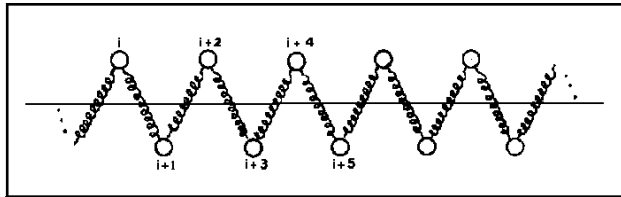
Usando el hecho de que:

$$x_{i+1} = \mu_i x_i \quad \text{y como} \quad \mu_i = e^{\alpha+i\pi};$$

resulta:

$$\begin{aligned} x_{i+1} &= e^{\alpha+i\pi} x_i = -e^{\alpha} x_i \\ x_{i+2} &= \mu_{i+1} x_{i+1} = -e^{\alpha_{i+1}+i\pi} e^{\alpha+i\pi} x_i = +e^{\alpha_i+\alpha_{i+1}} x_i \\ x_{i+3} &= \mu_{i+2} x_{i+2} = -e^{\alpha_i+\alpha_{i+1}+\alpha_{i+2}} x_i \\ &\dots \\ x_{i+n} &= e^{\alpha_i+\alpha_{i+1}+\alpha_{i+2}+\dots+\alpha_{i+n-1}} e^{in\pi} x_i \quad \text{con} \quad i = 1, \dots, n \end{aligned}$$

Analizando la forma general vemos que si n es par, las partículas: $i+2, i+4, \dots, i+n+2$, se mueven en la misma forma, podemos decir que van en la misma fase; si n es impar entonces las partículas: $i+1, i+3, \dots, i+n-1$ van en la misma fase, gráficamente tenemos

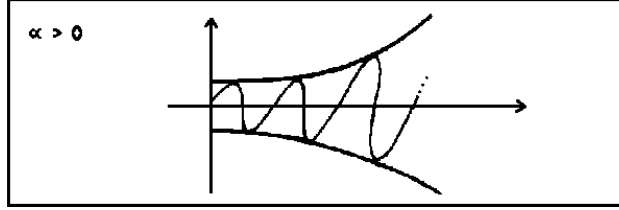


Como se verá posteriormente, esto es lo que da la interpretación de la rama acústica, en vibraciones de redes.

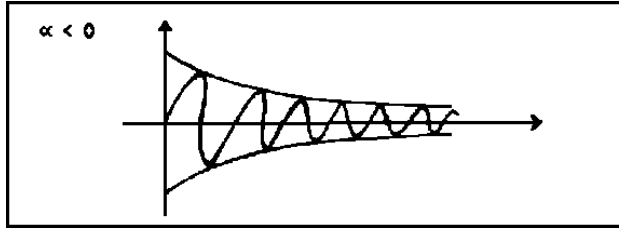
Cuarto Caso. Si $\phi = \alpha \pm i\beta$ resulta:

$$\mu = 2 \cos \beta e^\alpha = 2e^\alpha \sqrt{1 - \sin^2 \beta}$$

Por lo tanto en este caso, tendremos un movimiento ondulatorio modulado por un factor exponencial que depende de la parte real de ϕ ; por lo tanto si $\alpha > 0$, entonces e^α es una exponencial creciente, este factor no es otra cosa que la amplitud que nos va a modular la función ondulatoria, gráficamente.



El caso en que $\alpha < 0$, da lugar a una exponencial decreciente, que también nos va a modular la función ondulatoria, gráficamente tenemos.



2.8 Ecuación característica para μ , propiedades de la matriz de transferencia.

Nos interesa conocer los factores de propagación μ , por lo cual calculamos la ecuación característica de la matriz de transferencia T , esto es:

$$\begin{bmatrix} \frac{-a_1}{a_2} - \mu & \frac{\lambda - a_0}{a_2} & -\frac{a_1}{a_2} & -\frac{a_2}{a_2} \\ 1 & -\mu & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -\mu & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -\mu \end{bmatrix} = 0$$

Explícitamente:

$$\mu^4 + \frac{a_1}{a_2} \mu^3 + \frac{(a_0 - \lambda)}{a_2} \mu^2 + \frac{a_1}{a_2} \mu + 1 = \chi(\mu) = 0 \quad (2.21)$$

Si hacemos $\mu = 1/\nu$ y la sustituimos en (2.21) resulta

$$\frac{1}{\nu^4} + \frac{a_1}{a_2} \frac{1}{\nu^3} + \frac{(a_0 - \lambda)}{a_2} \frac{1}{\nu^2} + \frac{a_1}{a_2} \frac{1}{\nu} + 1 = 0 \quad (2.22)$$

Ahora bien $a_2 \neq 0$ en principio, ya que sino lo fuera estaríamos tratando con interacciones a primeros vecinos, además el factor constante de un polinomio es el producto de todas las raíces del polinomio, como el polinomio característico que nos resultó tiene el factor constante distinto de cero, esto quiere decir que ninguna de las raíces del polinomio es cero, entonces es posible decir que una de las raíces es de la forma $\mu = 1/\nu$ así si multiplicamos a (2.22) por ν^4 , tenemos.

$$1 + \frac{a_1}{a_2}\nu + \frac{(a_0 - \lambda)}{a_2}\nu^2 + \frac{a_1}{a_2}\nu^3 + \nu^4 - \chi(\nu) = 0$$

Analizando esta última ecuación, vemos que es exactamente de la misma forma que la ecuación (2.21); de esto deducimos un resultado interesante que nos permite afirmar que sí, una de las raíces es μ entonces otra de las raíces es $1/\mu$, es decir:

$$\text{Si } \chi(\mu) = 0 \rightarrow \chi(1/\mu) = 0.$$

Por lo tanto todas las raíces del polinomio característico ocurren en parejas recíprocas, existiendo dos casos degenerados que corresponden al valor “1” y al “0” que no tienen recíproco.

Supongamos que $\epsilon, 1/\epsilon, \zeta$ y $1/\zeta$ son raíces del polinomio característico, por lo tanto podemos escribir que:

$$a_2(\mu - \epsilon) (\mu - 1/\epsilon) (\mu - \zeta) (\mu - 1/\zeta) = 0$$

Efectuando un producto parcial adecuado resulta:

$$[\mu^2 - \mu(\epsilon + 1/\epsilon) + 1] [\mu^2 - \mu(\zeta + 1/\zeta) + 1] = 0$$

definiendo:

$$\epsilon + 1/\epsilon = a \quad \text{y} \quad \zeta + 1/\zeta = b \quad (2.23)$$

efectuando el producto y agrupando términos semejantes, resulta finalmente:

$$\mu^4 - (a + b)\mu^3 + (2 + ab)\mu^2 - (a + b)\mu + 1 = 0 \quad (2.24)$$

Si comparamos las ecuaciones (2.21) y (2.23) e igualamos los coeficientes, resultan las siguientes ecuaciones.

$$a + b = -\frac{a_1}{a_2} = \alpha = \gamma \quad (2.25)$$

$$2 + ab = \frac{a_0 - \lambda}{a_2} = -\beta \quad (2.26)$$

Con este sistema de ecuaciones acopladas, es posible encontrar la suma de un par de raíces recíprocas μ , en la siguiente forma: despejemos de (2.24) b y sustituyámoslo en (2.25), con lo que se tiene

$$a^2 - \alpha a - (2 + \beta) = 0$$

En donde las soluciones de esta ecuación cuadrática en “ a ” son:

$$a = \frac{\alpha \pm \sqrt{\alpha^2 + 4(2 + \beta)}}{2} \quad (2.27)$$

En donde se tiene explícitamente a “ a ” en términos de los coeficientes α y β que son conocidos, con esta última ecuación podemos calcular una raíz individual ϵ , para lo cual empleamos la definición de “ a ”, esto es:

$$a = \epsilon + 1/\epsilon \text{ lo cual desarrollado resulta:}$$

$$\epsilon^2 - \epsilon a + 1 = 0$$

y finalmente esta ecuación cuadrática tiene por soluciones:

$$\epsilon = \frac{a}{2} \pm \sqrt{(a/2)^2 - 1} \quad (2.28)$$

si definimos $a/2 = \cos \phi$, lo cual es una sustitución usual, se obtiene

$$\epsilon = \cosh \phi + \sinh \phi = e^{\pm \phi}$$

que es un resultado usado con anterioridad.

Por lo tanto podemos garantizar que las ondas se suceden en parejas, entonces en el movimiento a través de una cadena, una componente aumenta y la otra disminuye, ya que ocurren en parejas recíprocas, por el comportamiento de nuestras ondas podemos decir que se trata de ondas parciales, que son ondas limitadas en el espacio. Lo importante es que para cada onda que crezca hay otra que disminuye, ya que la matriz es real su polinomio característico tiene coeficientes reales, podemos asegurar que si sus raíces son complejas y si la conjugada y la recíproca conjugada son diferentes, entonces resultará que el número de onda es imaginario puro; esto nos da una diferencia con respecto al caso de interacción a primeros vecinos en donde resulta que la conjugada y su recíproca son iguales.

O sea siempre existe oscilación con amplitud constante aún cuando la fase cambie y tengamos ondas crecientes y decrecientes, ya que el factor de fase es siempre 1, como es sabido a las ondas de esta naturaleza se les llama ondas estacionarias.

Es necesario mencionar que para interacciones a vecinos más lejanos, no podemos asegurar que una conjugada y su recíproca sean iguales, probablemente sean distintas, en cuyo caso tendremos las llamadas ondas superficiales; es característico cuando hay interacciones a vecinos lejanos, que existan vibraciones de ondas confinadas sólo a la superficie.

Una vez obtenidas las ecuaciones que nos dan las raíces individuales esto es las frecuencias espaciales, podemos proceder a encontrar la forma de los eigenvectores en términos de estas raíces individuales, esto es.

Para el cálculo del eigenvector columna, supongamos que a, b, c y d son las componentes de este vector, por lo tanto podemos formar el sistema de eigenvalores siguiente:

$$\begin{bmatrix} \alpha & \beta & \gamma & \delta \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{bmatrix} = \epsilon \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{bmatrix}$$

desarrollando los productos indicados resulta

$$\left. \begin{array}{l} \alpha a + \beta b + \gamma c + \delta d = \epsilon a \\ a = \epsilon b \\ b = \epsilon c \\ c = \epsilon d \end{array} \right\} \quad (2.29)$$

Por conveniencia y como siempre es posible hacerlo definamos $d = 1$ con lo que resulta

$$a = \epsilon^3, \quad b = \epsilon^2, \quad c = \epsilon^1 \quad \text{y} \quad d = \epsilon^0$$

Por lo tanto con estos valores tenemos la forma del eigenvector además es conveniente introducir la notación de “KET” (ver ref. [8]), para el i -ésimo eigenvector columna de la matriz de transferencia, correspondiente al eigenvalor ϵ_i , esto es

$$|\epsilon_i\rangle = \begin{bmatrix} \epsilon_i^3 \\ \epsilon_i^2 \\ \epsilon_i^1 \\ \epsilon_i^0 \end{bmatrix} \quad (2.30)$$

Sustituyendo los valores obtenidos de a, b, c y d en la primera de las ecuaciones (2.29) resulta

$$\alpha\epsilon^3 + \beta\epsilon^2 + \gamma\epsilon + \delta = \epsilon^4 \quad (2.31)$$

lo cual como vemos, nos reproduce la ecuación característica (2.21) lo cual implica, la consistencia con las demás ecuaciones.

Ahora calculemos los eigenvectores renglón, para lo cual supongamos que (a, b, c, d) es un vector con componentes a ser determinadas, esto es:

$$[a, b, c, d] \begin{bmatrix} \alpha & \beta & \gamma & \delta \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} = \epsilon[a, b, c, d]$$

explícitamente tenemos

$$\begin{aligned} a\alpha + b &= \epsilon a \\ a\beta + c &= \epsilon b \\ a\gamma + d &= \epsilon c \\ a\delta &= \epsilon d \end{aligned}$$

tomando por conveniencia $a = 1$, tenemos

$$d = \delta/\epsilon; \quad b = \epsilon - \alpha \quad \text{y} \quad c = \epsilon(\epsilon - \alpha) - \beta$$

Con estos valores el i -ésimo eigenvector renglón, usando la notación del “bra” toma la forma siguiente:

$$\langle \epsilon_i | = [1, \epsilon - \alpha, \epsilon(\epsilon - \alpha) - \beta, \delta/\epsilon]$$

Es conveniente ponerlo en una norma más adecuada, para lo cual multiplicamos por ϵ , esto es:

$$\langle \epsilon_i | = [\epsilon, \epsilon^2 - \epsilon\alpha, \epsilon^3 - \epsilon^2\alpha - \epsilon\beta, \delta]$$

2.9 Aplicación del teorema espectral a la matriz de transferencia.

Una vez obtenido, los eigenvalores y eigenvectores de la matriz de transferencia, podemos emplear el “teorema espectral” (ref. [9]), el cual nos dice que podemos expresar cualquier matriz en función de sus eigenvalores y operadores de proyección, esto es, para el caso particular que estamos tratando.

$$T = \sum_{i=1}^4 \frac{\epsilon_i}{\langle \epsilon_i | \epsilon_i \rangle} |\epsilon_i\rangle \langle \epsilon_i| \quad (2.32)$$

Ahora supongamos que tenemos dos eigenvalores distintos ϵ_i y ϵ_j y calculemos el producto interior $\langle \epsilon_i | \epsilon_j \rangle$.

$$\langle \epsilon_i | \epsilon_j \rangle = \epsilon_i \epsilon_j^3 + \epsilon_j^2 (\epsilon_i - \alpha \epsilon_i) + \epsilon_j (\epsilon_i^3 - \alpha \epsilon_i^2 - \beta \epsilon_i) + \delta = 0 \quad (2.33)$$

factorizando, sumando un cero y tomando en cuenta que

$$\chi(\epsilon_i) = \epsilon_i^4 - \alpha \epsilon_i^3 - \gamma \epsilon_i^2 - \gamma \epsilon_i - \delta = 0 \quad (2.34)$$

resulta que

$$\langle \epsilon_i | \epsilon_j \rangle = \frac{1}{\epsilon_i - \epsilon_j} [\epsilon_i \chi(\epsilon_j) - \epsilon_j \chi(\epsilon_i)] = 0 \quad (2.35)$$

lo cual resulta cero, ya que las raíces son soluciones de la ecuación característica y además nos dice que nuestros vectores son ortogonales, lo cual es un resultado importante que emplearemos posteriormente.

Supongamos que $\epsilon_i = \epsilon_j$ y analisemos que pasa con el producto interior, con estos eigenvalores, por lo tanto de (2.32) y (2.31) resulta:

$$\langle \epsilon_i | \epsilon_i \rangle = \alpha \epsilon_i^3 + 2\beta \epsilon_i^2 + 3\gamma \epsilon_i + 4\delta \neq 0 \quad (2.36)$$

es distinto de cero ya que de las propiedades de ecuaciones características con raíces distintas, se demuestra que ningún polinomio de grado menor que el grado del polinomio característico es cero, con excepción del polinomio puro.

Como vemos este producto interior resulta distinto de cero por lo tanto podemos emplear el teorema espectral, para poder expresar, la matriz de transferencia a la enésima potencia.

Por otra parte, si el producto interior de dos eigenvectores con el mismo eigenvalor es distinto de cero, quiere decir que es posible formar un conjunto completo de eigenvectores, por lo tanto queremos investigar si con los eigenvectores de la matriz de transferencia, es posible obtener un conjunto completo de eigenvectores.

Calculemos el producto exterior.

$$\sum_{i=1}^4 |\epsilon_i\rangle \langle \epsilon_i|$$

tal suma es el producto exterior de los supervectores:

$$Z = \begin{bmatrix} \langle 1| \\ \langle 2| \\ \langle 3| \\ \vdots \\ \langle n| \end{bmatrix}$$

$$Z^{-1} = [|1\rangle, |2\rangle, \dots, |n\rangle]$$

Por lo tanto

$$ZZ^{-1} = \begin{bmatrix} \langle 1|1\rangle & \langle 1|2\rangle & \dots & \langle 1|n\rangle \\ \langle 2|1\rangle & \langle 2|2\rangle & \dots & \langle 2|n\rangle \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \langle n|1\rangle & \langle n|2\rangle & \dots & \langle n|n\rangle \end{bmatrix}$$

Usando los resultados obtenidos en (2.34) y (2.35), resulta que la matriz ZZ' es completamente diagonal y cuyos elementos no son otra cosa que los polinomios dados por (2.35) que son polinomios distintos de cero, evaluados en las cuatro raíces, esto es:

$$ZZ^{-1} = \begin{bmatrix} \phi(\epsilon_1) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \phi(\epsilon_2) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \phi(\epsilon_3) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \phi(\epsilon_4) \end{bmatrix}$$

Estos elementos diagonales son distintos de cero, lo que implica que su determinante es distinto de cero, que es precisamente la condición de “completamiento”.

Por otra parte el hecho de que la matriz de transferencia, tenga un conjunto completo de eigenvectores, se puede apreciar también del siguiente hecho; construimos el determinante ϵ cuyas columnas son los eigenvectores de la matriz de transferencia y además la matriz de este determinante, tiene por objeto diagonalizar la matriz de transferencia esto es:

$$\epsilon = \begin{bmatrix} \epsilon_1^3 & \epsilon_2^3 & \epsilon_3^3 & \epsilon_4^3 \\ \epsilon_1^2 & \epsilon_2^2 & \epsilon_3^2 & \epsilon_4^2 \\ \epsilon_1 & \epsilon_2 & \epsilon_3 & \epsilon_4 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\epsilon = (\epsilon_1 - \epsilon_2)(\epsilon_1 - \epsilon_3)(\epsilon_1 - \epsilon_4)(\epsilon_2 - \epsilon_3)(\epsilon_2 - \epsilon_4)(\epsilon_3 - \epsilon_4)$$

En donde $\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3$ y ϵ_4 son las cuatro raíces de la ecuación característica por otra parte, si dos columnas son iguales, lo que quiere decir que dos raíces lo sean, entonces tendremos dos columnas linealmente dependientes, lo cual implica que el determinante es igual a cero; pero para el caso en que estas raíces son distintas obtendremos que su solución es el producto de todas las diferencias posibles de las raíces en orden creciente como se puede apreciar en el determinante ϵ ; por lo tanto como para el caso que estamos tratando las raíces son todas diferentes, resulta que las columnas y por lo tanto los eigenvectores, son linealmente independientes y con esto podemos concluir que la matriz de transferencia tiene un sistema de coordenadas formada por los eigenvectores.

Existen varios métodos para demostrar que la solución dada con anterioridad es la correcta, una de ellas consiste en que la forma general del determinante ϵ , está dado por el determinante de Vandermonde (ver apéndice **A**), otra consiste de un método de solución directa, en ésta empleamos el hecho de que podemos restarle a una columna otra sin que el determinante se altere.

Es conveniente mencionar que con el eigenvector renglón $\langle \epsilon_i |$ podemos construir el deter-

minante siguiente:

$$\langle \epsilon_i | = (\epsilon_i, \epsilon_i^2 - \alpha\epsilon_i, \epsilon_i^3 - \alpha\epsilon_i^2 - \beta\epsilon_i, \delta) = \begin{vmatrix} \epsilon_1 & \epsilon_1^2 - \alpha\epsilon_1 & \epsilon_1^3 - \alpha\epsilon_1^2 - \beta\epsilon_1 & \delta \\ \epsilon_2 & \epsilon_2^2 - \alpha\epsilon_2 & \epsilon_2^3 - \alpha\epsilon_2^2 - \beta\epsilon_2 & \delta \\ \epsilon_3 & \epsilon_3^2 - \alpha\epsilon_3 & \epsilon_3^3 - \alpha\epsilon_3^2 - \beta\epsilon_3 & \delta \\ \epsilon_4 & \epsilon_4^2 - \alpha\epsilon_4 & \epsilon_4^3 - \alpha\epsilon_4^2 - \beta\epsilon_4 & \delta \end{vmatrix}$$

El cual, después de ciertas multiplicaciones, se nos reduce al mismo determinante ϵ .

Otro resultado que es conveniente mencionar, está relacionado con el producto interior $\langle \epsilon_i | \epsilon_i \rangle$ y que consiste en lo siguiente:

Si al polinomio dado por (2.36) le sumamos un cuatro por cero, es decir:

$$4\chi(\epsilon_i) = 4\epsilon_i^4 - 4\alpha\epsilon_i^3 - 4\beta\epsilon_i^2 - 4\gamma\epsilon_i - 4\delta = 4 \times 0$$

resulta

$$\langle \epsilon_i | \epsilon_i \rangle = \epsilon_i(4\epsilon_i^3 - 3\alpha\epsilon_i^2 - 2\beta\epsilon_i - \delta)$$

en esta ecuación podemos apreciar, que lo que está en paréntesis es la derivada del polinomio característico, esto es

$$\langle \epsilon_i | \epsilon_i \rangle = \epsilon_i \cdot \chi'(\epsilon_i) \quad (2.37)$$

Si $\epsilon_i \neq 0$ la ecuación anterior, es distinta de cero, ya que vamos a suponer que la ecuación característica no tiene raíces repetidas, por lo tanto $\chi(\epsilon_i)$ y $\chi'(\epsilon_i)$ no son cero evaluadas en el mismo punto.

Otro resultado que falta obtener, para poder hacer la sustitución completa en la ecuación (2.32) es el producto exterior.

$$|\epsilon_i\rangle \langle \epsilon_i| = \begin{bmatrix} \epsilon_i^4 & \epsilon_i^4(\epsilon_i - \alpha) & \epsilon_i^3[\epsilon_i^2(\epsilon_i - \alpha) - \beta] & \epsilon_i^3\delta \\ \epsilon_i^3 & \epsilon_i^3(\epsilon_i - \alpha) & \epsilon_i^2[\epsilon_i^2(\epsilon_i - \alpha) - \beta] & \epsilon_i^2\delta \\ \epsilon_i^2 & \epsilon_i^2(\epsilon_i - \alpha) & \epsilon_i[\epsilon_i^2(\epsilon_i - \alpha) - \beta] & \epsilon_i\delta \\ \epsilon_i & \epsilon_i(\epsilon_i - \alpha) & [\epsilon_i^2(\epsilon_i - \alpha) - \beta] & \delta \end{bmatrix} \quad (2.38)$$

Por lo tanto, si sustituimos las ecuaciones (2.37) y (2.38) en (2.32) obtendremos la forma de la matriz de transferencia explícitamente en función de sus eigenvalores y eigenvectores. La importancia de este resultado, es que nos permite calcular la matriz de transferencia a la n -ésima potencia simplemente elevando los eigenvalores, es decir

$$T^n = \sum_{i=1}^n \frac{\epsilon_i^n}{\langle \epsilon_i | \epsilon_i \rangle} |\epsilon_i\rangle \langle \epsilon_i|$$

Esto es un resultado que se puede demostrar fácilmente, haciendo uso de algunos resultados anteriores, por ejemplo calculemos $T \cdot T$ para el caso más general.

$$\begin{aligned} T \cdot T &= \left(\sum \frac{\epsilon_i}{\langle \epsilon_i | \epsilon_i \rangle} |\epsilon_i\rangle \langle \epsilon_i| \right) \left(\sum \frac{\epsilon_j}{\langle \epsilon_j | \epsilon_j \rangle} |\epsilon_j\rangle \langle \epsilon_j| \right) \\ T^2 &= \sum \frac{\epsilon_i \epsilon_j}{\langle \epsilon_i | \epsilon_i \rangle \langle \epsilon_j | \epsilon_j \rangle} |\epsilon_i\rangle \langle \epsilon_i | \epsilon_j \rangle \langle \epsilon_j| \end{aligned}$$

Empleando el resultado obtenido en (2.35) vemos que únicamente los productos exteriores no cruzados serán distintos de cero, es decir, empleamos la ortogonalidad de nuestros eigenvectores; por lo tanto T^2 será distinto de cero en el caso de que $i = j$, con lo que resulta.

$$T^2 = \sum \frac{\epsilon_i^2}{\langle \epsilon_i | \epsilon_i \rangle} |\epsilon_i\rangle \langle \epsilon_i|$$

Y así sucesivamente podemos hacer el cálculo para potencias más altas, lo cual no es necesario hacer en este trabajo ya que su demostración completa se encuentra en ref. [10], una observación que podemos hacer de este resultado, es que los productos exteriores son operadores idempotentes.

2.10 Tercer problema de eigenvalores.

El tercer problema de eigenvalores tiene por objeto determinar las componentes de los eigenvectores de la matriz que resulta del menor de $T^{(n)}$ lo cual puede ocurrir únicamente para ciertas frecuencias esto es:

$$\begin{bmatrix} z_{i+2} \\ z_{i+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q_{11}^{[i]}(\lambda) & q_{12}^{[i]}(\lambda) \\ q_{21}^{[i]}(\lambda) & q_{22}^{[i]}(\lambda) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z_2 \\ z_1 \end{bmatrix}$$

En donde Z_2, Z_1 son constantes arbitrarias, pero que deben ser componentes de los eigenvectores de la matriz

$$\begin{bmatrix} q_{11}^i(\lambda) & q_{12}^i(\lambda) \\ q_{21}^{(i)}(\lambda) & q_{22}^{(i)}(\lambda) \end{bmatrix}$$

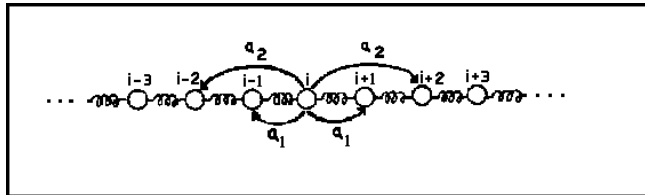
Con esto se determinaron las dos primeras componentes de los eigenvectores; esta parte de la teoría se utilizó para graficar los modos normales de vibración, como veremos posteriormente.

Capítulo 3

PROPIEDADES DE LA SIMETRÍA DE LA CADENA, Y DE MATRICES CUYOS EIGENVALORES OCURREN EN PAREJAS RECÍPROCAS.

3.1 Simetría del modelo.

Lo que nos interesa ahora, es analizar la relación entre los resultados anteriores y la simetría de los bloques de la cadena, se tiene la cadena lineal de masas equidistantes, como se muestra en la siguiente figura.



Analizando esta gráfica vemos que el coeficiente “ a_2 ” depende de la interacción entre la masa i y su segunda vecina por la derecha más próxima, esto es la $i + 2$; pero este coeficiente debe ser el mismo en la otra dirección, debido al modelo uniforme que adoptamos, esto es, la interacción con la segunda partícula por la izquierda más próxima; esta misma consideración se aplica al coeficiente “ a_1 ” que resulta de interacciones a primeros vecinos, esto impone una uniformidad. Esta uniformidad es consecuencia de las leyes de Newton que involucran la simetría de fuerzas, y también de la homogeneidad de la cadena, por lo tanto es un resultado en el que se puede confiar físicamente.

3.2 Simetría local.

Un resultado que se obtiene de la simetría de la cadena es el siguiente: tenemos la matriz de transferencia T .

$$T = \begin{bmatrix} \gamma & \beta & \gamma & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

y cuya matriz inversa tiene la forma:

$$T^{-1} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & \gamma & \beta & \gamma \end{bmatrix}$$

haciendo un análisis de la matriz T^{-1} es posible observar su relación con T , puede decirse que si leemos los renglones de T^{-1} de derecha a izquierda y las columnas de abajo hacia arriba, tal parece que estamos leyendo la matriz T .

Por inspección es posible factorizar la matriz T^{-1} en la forma siguiente:

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \gamma & \beta & \gamma & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & \gamma & \beta & \gamma \end{bmatrix}$$

Definamos la matriz

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} = K$$

En donde K es una matriz que al operar a la izquierda invierte el orden de los renglones y a la derecha el orden de las columnas, que es precisamente la transformación que sufre la matriz T para convertirse en T^{-1} esto es, en forma simplificada.

$$KTK = T^{-1} \tag{3.1}$$

Por simple multiplicación, es fácil verificar que:

$$K^2 = II$$

y por lo tanto

$$K = K^{-1}$$

Por lo cual es posible escribir que

$$K^{-1}TK = T^{-1} \tag{3.2}$$

Ahora bien, debido a que los eigenvalores son invariantes ante una transformación de coordenadas resulta, que T^{-1} tiene como raíces características a las recíprocas de T ; por lo

tanto tenemos otra demostración de que los eigenvalores de la matriz de transferencia ocurren en parejas recíprocas.

Además si aplicamos K a un vector $X = (x_1, x_2, x_3, x_4)$, se obtiene

$$KX = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_4 \\ x_3 \\ x_2 \\ x_1 \end{bmatrix}$$

Por lo tanto esta transformación es una simetría por reflexión que leemos en otra dirección, por lo tanto el efecto de K es pasar de

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} x_4 \\ x_3 \\ x_2 \\ x_1 \end{bmatrix}$$

El resultado es una doble reflexión que puede analizarse en los siguientes términos. Como se conoce la transformación K que es un tipo de matriz parcialmente diagonalizada, podemos afirmar lo anterior, además de que al operar K , el subespacio generado por x_1 y x_4 , no se intercala con el subespacio generado por x_2 y x_3 . Una cosa en que estamos interesados es conocer los eigenvectores de matrices del tipo K , ya se han obtenido algunos resultados con matrices simétricas 2×2 cuyo determinante es igual a menos uno, para el caso de la matriz K podemos separarla en submatrices de este tipo, se sabe que los eigenvectores tienen la forma siguiente:

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \quad \text{y} \quad \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}$$

Correspondientes a los eigenvalores 1 y -1 respectivamente, la transformación es una reflexión a través del plano x_2, x_3 y la orientación de los planos es de 45° .

Ahora lo que nos interesa es diagonalizar la matriz K , para lo cual es posible verificar que la matriz cuyas columnas son los eigenvectores de K es la siguiente:

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (3.3)$$

Es fácil comprobar que $U^2 = II$ y $U = U^{-1}$ por lo tanto

$$UKU = K' \quad (3.4)$$

En donde K' es la matriz K diagonalizada; explícitamente

$$\begin{aligned} UKU^{-1} &= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} = K' \end{aligned}$$

Por lo tanto los eigenvalores de la matriz K son: $1, 1, -1$ y -1 que eran los que se esperaban. Apliquemos la misma transformación a la matriz de transferencia, esto es:

$$\begin{aligned}
UTU^{-1} &= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \gamma & \beta & \gamma & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \\
UTU^{-1} &= \frac{1}{2} \left[\begin{array}{cc|cc} \gamma-1 & \beta+\gamma+1 & \beta-\gamma-1 & \gamma+1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ \hline 1 & -1 & -1 & 1 \\ \gamma-1 & \beta+\gamma-1 & \beta-\gamma+1 & \gamma+1 \end{array} \right] = T' \quad (3.5)
\end{aligned}$$

de la misma forma analizamos la relación (3.1) queremos analizar $K'T'K' = T'^{-1}$ y encontrar su relación con (3.1).

Efectuando el producto explícitamente resulta:

$$K'T'K' = \frac{1}{2} \left[\begin{array}{cc|cc} \gamma-1 & \beta+\gamma+1 & -\beta+\gamma+1 & -\gamma-1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ \hline -1 & 1 & -1 & 1 \\ 1-\gamma & 1-\beta-\gamma & \beta-\gamma+1 & \gamma+1 \end{array} \right] = T'^{-1} \quad (3.6)$$

Puede verificarse por un cálculo directo, que esta matriz es T'^{-1} la relación que existe entre T'^{-1} y T' es que si las consideramos divididas en submatrices de 2×2 , como se indica en (3.5) y (3.6) resulta:

$$T' = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{bmatrix} \quad y \quad T'^{-1} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} T_{11} & -T_{12} \\ -T_{21} & T_{22} \end{bmatrix} \quad (3.7)$$

Este resultado es útil para apreciar la simplificación involucrada por estas submatrices, en la forma siguiente:

Sumando las dos matrices de (3.7) resulta

$$T' + T'^{-1} = \begin{bmatrix} T_{11} & 0 \\ 0 & T_{22} \end{bmatrix} \quad T' - T'^{-1} = \begin{bmatrix} 0 & -T_{12} \\ -T_{21} & 0 \end{bmatrix}$$

Es conveniente denotar $T'^{-1} = 1/T'$, con lo cual resulta que podemos introducir la siguiente definición usual.

$$T' + \frac{1}{T'} = 2 \cosh \Phi = \begin{bmatrix} T_{11} & 0 \\ 0 & T_{22} \end{bmatrix}$$

En este caso vemos que resulta una matriz parcialmente diagonalizada; para el otro caso resulta:

$$T' - \frac{1}{T'} = 2 \sinh \Phi = \begin{bmatrix} 0 & T_{12} \\ T_{21} & 0 \end{bmatrix}$$

Que resulta una matriz parcialmente antidiagonalizada; en ambos casos Φ es una matriz.

Estos resultados son precisamente un consecuencia de un tipo de simetría local, pero es importante porque podemos simplificar la matriz como se ha visto; el polinomio característico

reducirlo de un polinomio de grado $2n$, a un polinomio de grado n , la segunda ventaja se debe a que cuando las raíces ocurren en parejas recíprocas, es conveniente tener una transformación que intercambie los eigenvectores y cuando utilizamos esta base, las partes simétrica y anti-simétrica se diagonalizan y obviamente conmutan, ya que son funciones de la misma matriz. Por lo tanto podemos escribir la matriz como la suma de dos partes que conmutan, estas partes tienen una forma tan simple, que nos servirán para otros métodos de solución de la ecuación característica.

3.3 Los dos subespacios que surgen de la propiedad de los eigenvalores en parejas recíprocas.

Calculemos la ecuación característica de los subespacios $T' + T'^{-1}$ esto es, para el subespacio T_{11} .

$$\begin{vmatrix} \gamma - 1 - \omega & \beta + \gamma + 1 \\ 1 & 1 - \omega \end{vmatrix} = 0$$

Resolviendo:

$$(\gamma - 1 - \omega)(1 - \omega) - (\beta + \gamma + 1) = 0$$

multiplicando

$$\begin{aligned} \omega^2 - \gamma\omega - (\beta - 2) &= 0 \\ \omega &= \frac{\gamma}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\gamma}{2}\right)^2 + (\beta + 2)} \end{aligned} \quad (3.8)$$

Para el subespacio T_{22} , la ecuación característica es:

$$\begin{vmatrix} -1 - \omega & 1 \\ \beta - \gamma + 1 & \gamma + 1 - \omega \end{vmatrix} = 0$$

Por lo tanto la ecuación característica es:

$$\begin{aligned} \omega^2 - \gamma\omega - \beta - 2 &= 0 \\ \omega &= \frac{\gamma}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\gamma}{2}\right)^2 + (\beta + 2)} \end{aligned} \quad (3.9)$$

O sea las raíces de las ecuaciones características de los dos subespacios, esto es, (3.8) y (3.9) son las mismas; por lo tanto podemos concluir que hay una degeneración entre los dos subespacios, diagonalizados, ya que esas dos raíces deben ser conjugadas; además ω es la raíz de la matriz $T' + T'^{-1}$.

3.4 Teorema acerca de las raíces en parejas recíprocas.

Analicemos como elevar a una potencia, una matriz cuya ecuación característica tiene raíces que ocurren en parejas recíprocas.

En primer lugar, tomaremos una matriz con las características mencionadas anteriormente y obtendremos sus eigenvalores y eigenvectores; el método es un artificio matemático, en el

sentido de que ésta es una forma de elevar una matriz a una potencia muy grande, este método se basa en el cálculo de los eigenvalores y eigenvectores para lo cual se puede aplicar el teorema de Silvester y obtener con ello, que una matriz se puede expresar como una función de sus eigenvalores, elevados a una cierta potencia, por sus operadores idempotentes.

Por lo tanto lo que nos interesa es obtener una fórmula, para matrices cuyas raíces ocurren en parejas recíprocas que nos permita elevarla a una cierta potencia.

Nuestra hipótesis es que, para todo eigenvalor μ , $1/\mu$ es también un eigenvalor, es por lo tanto conveniente numerar los eigenvalores de $-N/2 (= n)$ a $N/2$, en donde N es la dimensión de la matriz, además es necesario eliminar algunos casos excepcionales como: $\mu = 0$ que no tiene inverso, y $\mu = 1$ que da lugar a un par degenerado. Si una matriz posee tales eigenvalores, no podemos trabajar en su subespacio complementario usando técnicas bien establecidas. También supondremos que la matriz tiene un conjunto de eigenvectores, así que las fórmulas

$$T = \sum_{i=1}^n \mu_i \Gamma_i \quad (3.10)$$

$$\Gamma_i = \frac{\prod_{\mu_j \neq \mu_i} (T - \mu_j I)}{\prod_{j \neq i} (\mu_i - \mu_j)} \quad (3.11)$$

Son válidas en términos de los eigenvalores μ_i y operadores de proyección Γ_i . Cuando existen eigenvectores repetidos hay que cambiar la condición de que $\mu_i \neq \mu_j$ ya que el denominador es el producto de las diferencias de distintos eigenvalores y no de los índices, pero por el momento supondremos que todos estos eigenvectores son distintos (la demostración de la validez de (3.10) y (3.11) pueden verse en el apéndice B trabajando con (3.11), tomando en cuenta que, los eigenvalores ocurren en parejas recíprocas resulta:

$$\Gamma_i = \frac{\prod_{\substack{j \neq i \\ j > 0}} (T - \mu_j)(T - 1/\mu_j)}{(\mu_i - 1/\mu_i) \prod_{\substack{j \neq i \\ j > 0}} (\mu_i - \mu_j)(\mu_i - 1/\mu_j)} \quad (3.12)$$

Multiplicando explícitamente los factores y denotando los eigenvalores recíprocos por μ_{-i} , μ_{-j} resulta

$$\Gamma_i = \frac{\prod_{\substack{j \neq i \\ j > 0}} [T^2 - T(\mu_j + \mu_{-j}) + 1]}{(\mu_i - \mu_{-i}) \prod_{\substack{j \neq i \\ j > 0}} [\mu_i^2 - \mu_i (\mu_j + \mu_{-j}) + 1]} \quad (3.13)$$

Esta ecuación nos indica la conveniencia de emplear las definiciones de funciones hiperbólicas esto es:

$$\mu_i + \mu_{-i} = 2 \cosh \phi_i \quad \text{y} \quad \mu_i - \mu_{-i} = 2 \sinh \phi_i$$

en cuyo caso resulta $\mu = e^\phi$ como se había empleado con anterioridad, también es conveniente definir.

$$T + T^{-1} = 2 \cosh \Phi \quad (3.14)$$

donde $\cosh \Phi$ es una matriz, que está definida en los mismos términos de la fórmula espectral. Por lo tanto con estas equivalencias y suponiendo que todas las raíces son distintas, la ecuación (3.13) se transforma en:

$$\Gamma_i = \frac{T^{n-1} T - \mu_{-i}}{\mu_i^{n-1} 2 \sinh \phi_i} \cdot \frac{\prod_{\substack{j \neq i \\ j > 0}} (\cosh \Phi - \cosh \phi_j)}{\prod_{\substack{j \neq i \\ j > 0}} (\cosh \phi_i - \cosh \phi_j)}$$

Consideremos la fórmula para Γ_{-i} :

$$\Gamma_{-i} = \frac{T - \mu_i}{\mu_{-i} - \mu_i} \frac{\prod_{\substack{j \neq i \\ j > 0}} (T - \mu_j)(t - \mu_{-j})}{\prod_{\substack{j \neq i \\ j > 0}} (\mu_{-i} - \mu_j)(\mu_{-i} - \mu_{-j})} \quad (3.15)$$

Por un procedimiento similar resulta finalmente:

$$\Gamma_{-i} = \frac{T^{n-1}}{\mu_i^{-(n-1)}} \cdot \frac{T - \mu_i}{-2 \sinh \phi_i} \cdot \frac{\prod_{\substack{j \neq i \\ j > 0}} [\cosh \Phi - \cosh \phi_j]}{\prod_{\substack{j \neq i \\ j > 0}} [\cosh \phi_i - \cosh \phi_j]} \quad (3.16)$$

Notemos que la matriz $\cosh \Phi$ tiene como eigenvalores $\cosh \phi_i$, así que los productos, en las fórmulas para Γ_i y Γ_{-i} , son justamente los operadores de proyección para $\cosh \Phi$, esto es:

$$\gamma_i = \gamma_{-i} = \frac{\prod_{j \neq i} [\cosh \Phi - \cosh \phi_j]}{\prod_{j \neq i} [\cosh \phi_i - \cosh \phi_j]}$$

La diferencia entre Γ_i y Γ_{-i} , es por supuesto el reemplazamiento de μ_i por μ_{-i} y el signo menos involucrado en el \sinh .

En el empleo de la resolución espectral (ver apéndice) para calcular la función de T , estamos interesados en el cálculo de potencias de T este interés es debido al empleo directo que se puede hacer, en la condición que resultó para calcular los eigenvalores esto es, (2.17); por lo tanto lo que deseamos calcular en forma explícita es:

$$T^K = \sum_{i=-n}^n \mu_i^K \Gamma_i$$

la base de esto es suponer, que existe un conjunto completo de eigenvectores y por lo consiguiente en el caso no degenerado que todos los eigenvalores son distintos, ya que en este caso tendremos que existe un eigenvector para cada eigenvalor lo cual garantiza un número igual a la dimensión, por lo tanto:

Para un eigenvalor μ_1 existe otro $1/\mu_1$
 Para un eigenvalor μ_2 existe otro $1/\mu_2$ etc.

Es conveniente denotar a los recíprocos como $\mu_{-1}, \mu_{-2}, \dots$, con lo cual

$$T^K = \sum_{i=1}^{n=n/2} \{\mu_i^K \Gamma_i + \mu_{-i}^K \Gamma_i\} \quad (3.17)$$

Por otra parte para el caso que estamos tratando, los operadores de proyección (ver apéndice), están dados por:

$$\Gamma_i = \frac{T - \mu_i^{-1}}{2 \sinh \phi_i} \frac{T^{n-1}}{\mu_i^{n-1}} \gamma_i \quad y \quad \Gamma_{-i} = \frac{Q - \mu_i}{-2 \sinh \phi_i} \frac{T^{n-1}}{\mu_i^{-(n+1)}} \gamma_i \quad (3.18)$$

En donde el operador γ_i está definido como:

$$\gamma_i = \frac{\prod_{i < j}^n (\cosh \Phi - \cosh \phi_j)}{\prod_{i \neq j}^n (\cosh \phi_i - \cosh \phi_j)} = \gamma_{-i} \quad (3.19)$$

Sustituyendo los operadores dados por (3.18) y (3.19) en la ecuación (3.17) obtenemos

$$T^K = \sum_{i>0}^{n=N/2} \left[\mu_i^K \frac{T - \mu_i^{-1}}{2 \sinh \Phi} \frac{T^{n-1}}{\mu_i^{n-1}} \gamma_i + \mu_i^{-K} \frac{T - \mu_i}{-2 \sinh \phi_i} \frac{T^{n-1}}{\mu_i^{-(n-1)}} \gamma_i \right]$$

factorizando parcialmente tomando en cuenta que T^{n-1} no depende del índice de la suma:

$$T^K = T^{n-1} \sum_{i=1}^n \frac{1}{2 \sinh \phi_i} \left\{ T[\mu_i^{K-n+1} - \mu_i^{-(K-n+1)}] - II[\mu_i^{K-n} - \mu_i^{-(K-n)}] \right\} \gamma_i$$

Podemos reducir finalmente la ecuación, usando la definición de μ , esto es $\mu = e^\phi$, junto con el hecho de que T tiene inverso:

$$T^{K-n+1} = \sum_{i=1}^n \left\{ T \frac{\sinh(K-n+1)\phi_i}{\sinh \phi_i} - II \frac{\sinh(K-n)\phi_i}{\sinh \phi_i} \right\} \gamma_i \quad (3.20)$$

definiendo $m = K - n + 1$ y sustituyendo en (3.20) resulta

$$T^m = \sum_{i=1}^n \left\{ T \frac{\sinh m \phi_i}{\sinh \phi_i} - II \frac{\sinh(m-1)\phi_i}{\sinh \phi_i} \right\} \gamma_i$$

Que es finalmente la ecuación que nos permite calcular la matriz de transferencia a la m -ésima potencia.

Otra forma de la matriz T^m , se obtiene redefiniendo $m = K - n$ y multiplicando la ecuación obtenida por T^{-1} con lo que resulta:

$$Q^m = \sum_{i=1}^n \left\{ II \frac{\sinh(m+1)\phi_i}{\sinh \phi_i} - Q^{-1} \frac{\sinh m \phi_i}{\sinh \phi_i} \right\} \gamma_i \quad (3.21)$$

Y una tercera forma, que es conveniente tener para cálculos posteriores, es la que se obtiene de sumar las ecuaciones (3.20) y (3.21), y de emplear la relación trigonométrica:

$$\sinh(m+1)\phi_i - \sinh(m-1)\phi_i = 2 \cosh m \phi_i \sinh \phi_i$$

y además la definición $T - T^{-1} = 2 \sinh \Phi$, en donde Φ es una matriz (ver apéndice) de estas ecuaciones resulta:

$$Q^m = \sum_{i=1}^n \left\{ II \cosh m\phi_i - \sinh \phi \frac{\sinh m\phi_i}{\sinh \phi_i} \right\} \gamma_i$$

O sea tenemos tres fórmulas alternativas, para el caso en que queramos elevar a una potencia arbitraria una matriz también arbitraria, pero que cumple con las condiciones de que los eigenvalores se sucedan en parejas recíprocas y otras condiciones señaladas en el teorema, es conveniente señalar que el índice de la sumatoria se fija como la dimensión sobre dos, así por ejemplo cuando se trata de una matriz 2×2 , entonces $N = 2$ y $n = N/2 = 1$, por lo tanto existirá un solo término dado por T^{-1} y no existirá el factor γ_1 además este caso particular, se reduce al caso desarrollado con anterioridad el cual depende únicamente de si existen dos eigenvalores distintos. El desarrollo del caso que nos interesa de vibraciones a segundos vecinos, da lugar a matrices de 4×4 por lo tanto $N = 4 \rightarrow n = 2$.

3.5 Logaritmo de la misma clase de matrices.

Por un procedimiento similar, consideremos el logaritmo de una matriz cuyos eigenvalores ocurren en parejas recíprocas, esto es:

$$\ln T = \sum_{i=-n}^n \ln \mu_i \Gamma_i = \sum_{i>0} \ln \mu_i [\Gamma_i - \Gamma_{-i}]$$

En donde:

$$\Gamma_i - \Gamma_{-i} = \frac{T^{n-1}}{\sinh \phi_i} \gamma_i [T \cosh(n-1)\phi_i - II \cosh n\phi_i]$$

En donde hemos empleado la definición $\mu_i + \mu_{-i} = 2 \cosh \phi_i$, por lo tanto resulta:

$$\ln T = \sum_{i>0} \ln \mu_i \frac{T^{n-1}}{\sinh \phi_i} \{T \cosh(n-1)\phi_i - \cosh n\phi_i\} \gamma_i$$

Es conveniente mencionar, que todos estos cálculos serán empleados posteriormente.

Capítulo 4

RELACIÓN DE DISPERSIÓN

En esta parte lo que nos interesa encontrar, es la relación de dispersión para el interior de cualquier cadena; para lo cual es necesario analizar algunos conceptos.

4.1 Concepto de relación de dispersión en el presente modelo.

En el análisis del movimiento de una cadena lineal de masas necesariamente ambas frecuencias varían, si observamos esto en un intervalo de tiempo podemos comprobarlo, ya que las partículas van a oscilar tanto, que en un momento en que estén en su desplazamiento máximo rápidamente van a tratar de recuperar su posición inicial, pero debido a que la inercia es muy rápida, llegan a un desplazamiento máximo en el otro sentido, esto sucede en un pequeño intervalo de tiempo, entonces la función sinusoidal del tiempo, va a cambiar su fase, en lugar de que su fase sea igual a “ $\delta = 0$ ” que es un máximo, es $\delta = \varepsilon$, que es un poco menos que el máximo¹, por lo tanto nos vamos a mover con la cadena para poder observar, donde crece la fase espacial, para dar compensación al cambio de fase temporal, entonces el máximo puede ser que esté en una partícula, o en puntos intermedios entre dos partículas si se considera como continua la cadena, por lo tanto el análisis es similar, el del movimiento ondulatorio superficial en el agua, ya que en dicho movimiento da la impresión que el agua se mueve, pero en realidad el punto en donde ocurre el máximo es el que se mueve transversalmente, con lo cual la onda se puede trasladar a una gran distancia al movernos. Entonces realmente la velocidad de una onda es el cociente de la frecuencia temporal (deducida en el párrafo 2.2) y el número de onda, es decir la frecuencia espacial (definidas por 2.19); lo cual implica el concepto de Relación de Dispersión (ref. [11]), esto es $v = \lambda/\mu$, esto nos dice que tenemos la velocidad como función de “ λ ”, lo cual quiere decir que no es constante para todo “ λ ”, esto se puede interpretar como que las ondas no se mueven a la misma velocidad con diferentes frecuencias.

El resultado es, que una onda que tiene una cierta forma, en presencia de un tren de ondas, su forma se puede distorsionar demasiado ya que es un tipo de series de Fourier de varias ondas, por lo tanto su fase relativa en un mismo punto puede ser muy diferente. Si

¹Ocurre en medios infinitos, en donde sí es posible observarlo.

la onda se mueve sin distorsión quiere decir que la relación de dispersión es una constante y recíprocamente, si la relación de dispersión no es constante, entonces habrá distorsión. En general la relación de dispersión es cualquier función que involucra λ y μ , en otras palabras $\lambda = \lambda(\mu)$, que es precisamente lo que estamos interesados en obtener; además la dependencia de los dos eigenvalores μ y λ , obviamente existe como se puede comprobar de la ecuación característica de la matriz de relaciones de recurrencia (matriz T), esto es:

$$a_2\mu^4 + a_1\mu^3 + (a_0 - \lambda)\mu^2 + a_1\mu + a_2 = 0$$

4.2 Selección de parámetros.

Ahora vamos a introducir una nueva notación usando los elementos de la matriz de movimiento M .

Esto es debido a que los tres parámetros: a_1, a_2 y a_0 no influyen de la misma manera en la matriz, por lo tanto vamos a analizar estos parámetros en la siguiente forma.

Tenemos:

$$MX = \lambda X$$

Ahora veamos que pasa con los eigenvalores cuando la matriz M , le sumamos y multiplicamos un factor ε , esto es

1. Sumemos a M , εII , resultando

$$(M - \varepsilon II)X = (\lambda + \varepsilon)X$$

2. Multiplicando por el mismo factor

$$(\varepsilon M)X = (\varepsilon\lambda)X$$

Analizando la matriz de movimiento con estas dos modificaciones resulta que en el primer caso, le sumamos un factor a la diagonal principal y además los eigenvalores quedan afectados por este mismo factor, entonces como en la diagonal principal tenemos únicamente parámetros a_0 , en realidad son a éstos los que afecta directamente el factor sumado ε , por lo tanto es posible hacer $a_0 = 0$, o cualquier otro número, ya que su efecto queda compensado por la variación del factor ε ; el segundo caso implica que la matriz M cambia de norma en la misma magnitud que los eigenvalores, por lo tanto como los resultados físicos, son los mismos en cualquier sistema de coordenadas, esto quiere decir, que es posible hacer $a_0 = 0$, o cualquier otro número, es conveniente señalar que estos resultados se aplican a cualquier matriz que suceda en la práctica; por lo tanto si aplicamos este criterio a la matriz de transferencia vemos que de sus elementos definidos α, β, γ y δ en (2.13) el único que interesa es $\gamma = -a_1/a_2$ esto también se puede ver, porque si en la matriz de movimiento multiplicamos a los parámetros a_1 y a_2 por un mismo factor, los eigenvalores y por lo tanto los eigenvectores, quedan multiplicados por el mismo factor así, que de los parámetros el único que interesa es γ , por lo anterior se introduce el siguiente parámetro

$$Y = \frac{a_1}{4a_2} \tag{4.1}$$

En donde el cuatro es complemento arbitrario, pero que nos sirve para simplificar el álgebra que vaya resultando posteriormente.

También es conveniente definir el eigenvalor λ en una diferente norma, esto es:

$$\xi = -\frac{\lambda}{4(a_1 + a_2)} \quad (4.2)$$

La motivación para introducir el denominador, se debe al teorema que nos dice cual es el rango de los eigenvalores de una matriz, por lo tanto daremos la prueba de que el denominador de (4.2) es el correcto.

4.3 Teorema de Gerschgorin, condición mecánica y forma final de la relación de dispersión.

Ahora analizamos una forma, para encontrar el rango de eigenvalores de una matriz y una condición mecánica para el modelo empleado. Supongamos que M es una matriz arbitraria y construyamos el problema de eigenvalores siguiente en forma matricial, esto es:

$$\begin{bmatrix} & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ a_{i1} & a_{i2} & \cdots & a_{in} & \\ & & & & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}$$

nos interesa una componente, que explícitamente será:

$$\sum_{j=1}^n a_{ij}x_j = \lambda x_i$$

Pasando al lado derecho el término $a_{ii}x_i$ resulta:

$$\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n-1} a_{ij}x_j = (\lambda - a_{ii})x_i$$

Como siempre existe por lo menos un eigenvector distinto de cero supongamos que es el x_i , por lo tanto la ecuación anterior resulta:

$$\lambda - a_{ii} = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n-1} a_{ij} \frac{x_j}{x_i}$$

Supongamos además, que la componente i -ésima de este eigenvector tiene el módulo máximo, llamémosla x_i por lo tanto resulta, tomando además el valor absoluto en ambos miembros que:

$$|\lambda - a_{ii}| \leq \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n-1} |a_{ij}| \frac{|x_j|}{|x_i|}$$

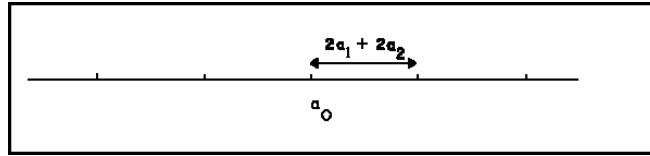
Como $x_t \geq x_j$ es posible suponer que $\left| \frac{x_j}{x_t} \right| \simeq 1$ por lo tanto resulta finalmente que:

$$|\lambda - a_{ii}| \leq \sum_{j \neq i}^{n-1} |a_{ij}| \quad (4.3)$$

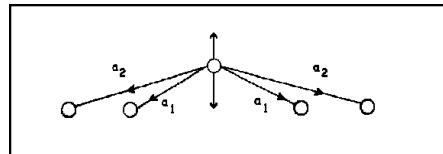
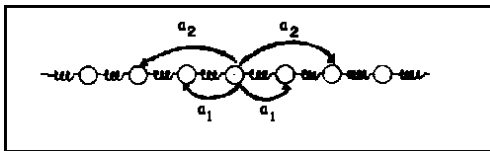
Este resultado es conocido como “teorema de Gerschgorin” (Ref. [12]) que nos dice: Que en el plano complejo cada eigenvalor de la matriz de elementos complejos M , se encuentra localizado en al menos uno de los círculos con centro a_{ii} y radio $\sum_{j \neq i}^{n-1} |a_{ij}|$ (que es la suma de los elementos de un renglón).

Como no sabemos cual de las componentes es la máxima, entonces se construyen los discos para cada una de las componentes y si no es el disco que interesa, no lo tomamos en cuenta, pero si lo es, entonces va a incluir el eigenvalor en cuestión; aunque es posible que al cambiar el eigenvalor cambie el elemento donde se alcanza el máximo, pero no importa, ya que se tienen todos los discos y en algunos de ellos se encuentra el eigenvalor.

Por lo tanto lo anterior nos da una información de los eigenvalores en particular, en el caso que estamos tratando, nos dice que se tienen un círculo con centro a_0 y radio $2a_1 + 2a_2$. Naturalmente que para nuestro problema únicamente nos interesa la línea real, ya que se trata de una matriz hermitiana con eigenvalores reales, o sea que el intervalo de eigenvalores para el modelo que estamos analizando es:



Ahora en el caso de vibraciones mecánicas, se tiene la siguiente restricción $a_0 = -2a_1 - 2a_2$. Esto quiere decir que la suma de los elementos a través de un renglón tiene que ser cero. Esta condición es debida a que un desplazamiento, en una dirección produce una fuerza la cual produce un desplazamiento en otra dirección y debido a que el efecto de estas fuerzas es producido por resortes que se encuentran a ambos lados de las partículas, entonces son los resortes los que dan lugar a las constantes que intervienen en la condición mecánica. Esta condición mecánica se puede visualizar mejor, por medio de un diagrama de fuerzas, esto es



Como vemos en este diagrama de fuerzas, si movemos una partícula desde su posición de equilibrio, el efecto de la interacción en ambos lados debe ser el mismo debido a la simetría de la cadena, por lo tanto va a interaccionar con las partículas en ambos lados y es precisamente la constante del resorte la que influye en el equilibrio de fuerzas.

La restricción es gráficamente razonable de postular, únicamente para nuestro caso que es un sistema vibracional, ya que en otros sistemas no es válida, como por ejemplo en problemas de mecánica cuántica, esto es sistema de electrones π .

Además si no fuera físicamente razonable postular que $a_0 + 2a_1 + 2a_2 = 0$ y la empleáramos, el resultado sería únicamente una traslación de todos los eigenvalores, como lo podemos ver del siguiente hecho.

Tenemos la restricción en la forma:

$$a_0 = -2(a_1 + a_2)$$

y del teorema de Gershgorin dado por la relación

$$|\lambda - a_0| \leq 2|(a_1 + a_2)| \quad (4.4)$$

lo cual nos permite escribir esto como

$$-2(a_1 + a_2) \leq \lambda - a_0 \leq 2(a_1 + a_2)$$

Sustituyendo el valor de a_0 resulta finalmente:

$$-4(a_1 + a_2) \leq \lambda \leq 0 \quad (4.5)$$

Analizando este resultado, vemos una justificación más de que las frecuencias resultan imaginarias, con la posibilidad de que sean cero, pero nunca tendremos el caso $\lambda > 0$. Otro resultado que nos da es la justificación del denominador de la relación (4.2).

Por lo tanto de (4.5) y (4.2) resulta:

$$0 \leq \xi \leq 1$$

Al menos en el rango en que $a_1 > 0$ y $a_2 > 0$ ya que debido a la estabilidad de las redes, puede suceder que $a_2 < 0$ o que a_1 sea negativa también y puede darse el caso en que estas dos constantes sean iguales (como se verá al analizar modelos especiales), por lo tanto es posible obtener interacciones negativas.

Ahora lo que nos interesa es calcular los eigenvalores de la matriz T en términos de los parámetros (2.13), esto es α, β, γ y δ por lo tanto seguimos tratando una cadena homogénea, en este caso la ecuación característica de T , como vimos anteriormente (Ec. 2.21) es

$$\mu^4 - \gamma\mu^3 - \beta\mu^2 - \gamma\mu + 1 = 0 \quad (4.6)$$

también vimos que las raíces ocurren en parejas recíprocas, supongamos que son: $\varepsilon, 1/\varepsilon, \xi, 1/\xi$ por lo tanto podemos definir el siguiente arreglo:

$$\begin{aligned} \varepsilon + \frac{1}{\varepsilon} &= a \\ \xi + \frac{1}{\xi} &= b \end{aligned}$$

y debido precisamente a la forma de la ecuación característica, o lo que es lo mismo de la matriz de transferencia, es posible escribir el polinomio característico como

$$x(\varepsilon, \xi) = (\mu - \varepsilon)(\mu - 1/\varepsilon)(\mu - \xi)(\mu - 1/\xi) = [\mu^2 - \mu a + 1][\mu^2 - \mu b + 1] \quad (4.7)$$

factorizando y reagrupando términos resulta finalmente que

$$x(\varepsilon, \xi) = \mu^4 - \mu^3(a+b) + \mu^2(ab+2) - \mu(a+b) + 1 \quad (4.7')$$

comparando esta ecuación con (4.6) tenemos

$$\gamma = a + b \quad (4.8)$$

$$\beta = -(2 + ab) \quad (4.9)$$

Resolviendo este sistema de ecuaciones resulta:

$$a = \frac{\gamma}{2} \pm \sqrt{(\gamma/2)^2 + 2 + \beta} \quad (4.10)$$

Además estamos interesados en regiones en que “ a ” es complejo o real puro (si es real puro, entonces debe ser mayor o menor que uno en valor absoluto), así como analizar el efecto de si las mismas raíces son puramente imaginarias o puramente reales.

La condición para que sea real puro es que el discriminante de la ecuación sea cero, esto es:

$$(\gamma/2)^2 + 2 + \beta = 0$$

Sustituyendo el valor de los parámetros γ y β dados por (2.13) resulta

$$\left(-\frac{a_1}{2a_2}\right)^2 + 2 + \frac{\lambda - a_0}{a_2} = 0$$

y utilizando la condición mecánica, esto es

$$a_0 = -2a_1 - 2a_2$$

resulta finalmente:

$$\frac{\lambda}{a_2} + \left(\frac{a_1}{2a_2} + 2\right)^2 = 0 \quad (4.11)$$

Que es exactamente la misma relación que se obtiene al considerar únicamente la condición mecánica, después de ciertos artificios matemáticos.

Otro resultado importante que se puede deducir de las ecuaciones anteriores, es la relación entre las constantes de interacción a primeros y segundos vecinos, esto lo podemos ver de la siguiente manera.

Usando el resultado de que

$$-4(a_1 + a_2) < \lambda < a_0$$

despejando λ de (4.11) y sustituyéndola en la desigualdad anterior.

$$-4(a_1 + a_2) \leq -a_2(a_1/2a_2 + 2)$$

factorizando y agrupando términos resulta

$$-\frac{2a_1}{a_2} + \left(\frac{a_1}{2a_2}\right)^2 = \frac{a_1}{a_2} \left(\frac{a_1}{4a_2} - 2\right) \leq 0$$

Analizando esta última desigualdad vemos que

$$\frac{a_1^2}{4a_2^2} \leq \frac{2a_1}{a_2}$$

lo cual quiere decir que $a_1 < 8a_2$ en cuyo caso, hay raíces complejas y por lo tanto habrá factores de fase compleja; para $a_1 \geq 8a_2$ existirán amortiguaciones puras, o soluciones puramente oscilatorias, en el valor extremo de λ ; el caso en que $a_1 = 8a_2$ es una razón crítica.

Anteriormente mencionamos como una relación de dispersión puede ser deducida, a partir de la ecuación característica, la obtención es directa como podemos apreciarlo de la siguiente forma: Usando la ecuación (4.6), junto con los parámetros definidos en (2.13) resulta:

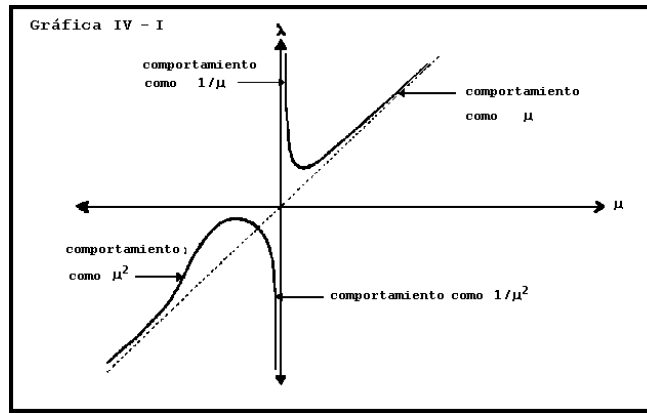
$$\frac{a_2\mu^4 + a_1\mu^3 + a_1\mu + a_2}{\mu^2} = a_0 - \lambda$$

despejando λ resulta:

$$\lambda = a_0 - a_1(\mu + 1/\mu) - a_2(\mu^2 + 1/\mu^2) \quad (4.12)$$

Que es la relación de dispersión, ya que nos da una relación de frecuencia espacial, con la temporal.

La gráfica de esta relación de dispersión es la siguiente:



Otra relación de dispersión que nos puede dar bastante información se obtiene de la siguiente forma.

Pongamos los elementos de la matriz de transferencia γ y β en función de Y y de ξ , esto es, de (4.1) y (4.2) resulta:

$$\gamma = -\frac{a_1}{a_2} = -4Y = a + b \quad (4.13)$$

$$\beta = \frac{\lambda - a_0}{a_2} = 2(1 - 2\xi)(1 + 4Y) \quad (4.14)$$

Para solucionar este sistema de ecuaciones, despejamos b de (4.3) y sustituyámoslo en (4.14) resultando

$$a^2 + 4aY - [2 + 2(1 - 2\xi)(1 + 4\xi)] = 0$$

Por lo tanto las soluciones para "a" están dadas por

$$a = -2Y \pm 2\sqrt{(Y + 1)^2 - \xi(1 + 4Y)} \quad (4.15)$$

Esta ecuación es una relación de dispersión porque relaciona a “ a ” como función de ε y λ y de las constantes del modelo, además se tienen dos alternativas para tratar esta ecuación; una es solucionar $\xi = \xi(\mu)$ ó $\mu = \mu(\xi)$ dependiendo de la conveniencia.

Es conveniente poner la ecuación (4.15) en una forma más explícita anteriormente definimos

$$a = \varepsilon + \frac{1}{\varepsilon} \quad \text{y} \quad \phi = \ln \varepsilon$$

por lo tanto

$$a = 2 \cosh \phi.$$

Por lo tanto la ecuación (4.15) queda finalmente como:

$$\cosh \phi = -Y \pm \sqrt{(Y+1)^2 - \xi(1+4Y)} \quad (4.16)$$

Que es la relación de dispersión para el interior de cualquier cadena por lo tanto es conveniente analizarla en forma detallada.

Lo que interesa en principio es analizar cuándo la expresión es real o compleja, ya que si $\cosh \phi$ es complejo necesariamente que ϕ lo es también.

Por lo tanto la frontera entre real y complejo es cuando el discriminante de (4.16) es igual a cero, esto es

$$(Y+1)^2 - \xi(1+4Y) = 0$$

despejando ξ resulta

$$\xi = \frac{(Y+1)^2}{(1+4Y)} \quad (4.17)$$

Esta ecuación la podemos graficar, ya que $\xi = \xi(Y)$ por lo tanto es necesario analizarla en la forma siguiente: ξ tiene un polo en $Y = -1/4$.

Cuando $Y \rightarrow \infty$ entonces $\xi \simeq \frac{1}{4}$ y si $\xi = 0$ entonces $(Y+1)^2 = 0 \rightarrow Y = -1$.

Para obtener un extremo calculemos la derivada, esto es

$$\frac{d\xi}{dY} = \frac{1}{(1+4Y^2)} [2(Y+1)(1+4Y) - 4(Y+1)^2]$$

Como nos interesa un extremo, hagamos $\frac{d\xi}{dY} = 0$, entonces

$$(Y+1)[(1+4Y) - 2(Y+1)] = 0$$

Por lo tanto en $Y = -1 \rightarrow (-1+2Y) = 0 \rightarrow Y = 1/2$. Evaluando $\xi = \xi(Y)$ en los puntos $Y = -1$; $y = 1/2$ resulta

$$\begin{aligned} \xi(-1) &= 0 \\ \xi(1/2) &= 9/12 = 3/4 \end{aligned}$$

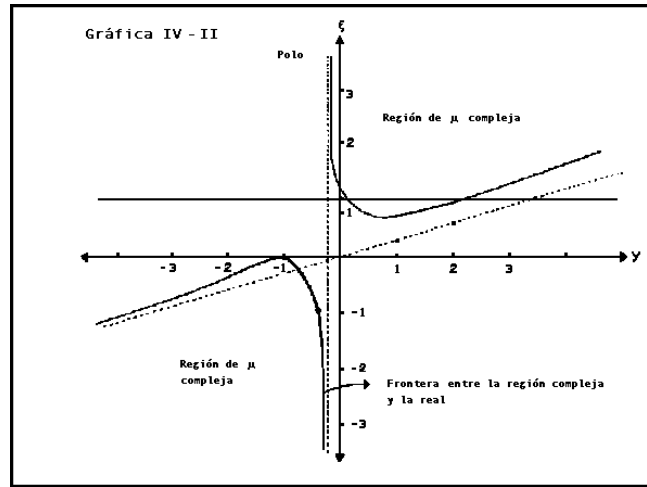
Y es fácil comprobar que ocurre un mínimo en $(1/2, 3/4)$. También es posible ver cuando la expresión es positiva o negativa si $Y \rightarrow 0$ y $\xi \rightarrow \infty$ entonces $\xi \gg Y$ lo cual nos indica que la expresión es negativa.

Además, cuando $\xi = 1$ entonces

$$Y^2 + 2Y + 1 = 1 + 4Y$$

$$Y^2 = 2Y \rightarrow \begin{cases} Y = 0 \\ Y = 2 \end{cases}$$

Con todos estos datos podemos construir la gráfica de la frontera entre la parte real y compleja ξ , gráfica IV-II.



Como se puede ver, por combinaciones de ξ y Y en la región compleja $\cosh \phi$ es complejo, lo cual quiere decir que ϕ es complejo, es decir, la frecuencia en esta región vamos a ver una onda oscilatoria con factor exponencial.

Analicemos las diferentes regiones correspondientes a los distintos valores que puede tomar el parámetro C definido como

$$\cosh \phi = C \tag{4.18}$$

Caso Real. $C > 1 \rightarrow \phi$ real

Caso Imaginario $-1 \leq C \leq 1$

Caso en que existe un cambio de fase. $\phi = \alpha + i\pi \dots \alpha$ es real, entonces resulta

$$C = -\cosh \alpha$$

Ahora estamos interesados en contornos en los que C pasa, por estos puntos, para lo cual es necesario hacer algunas manipulaciones algebraicas del $\cosh \alpha = C$, en la forma siguiente: De (4.16) tenemos que:

$$\begin{aligned} C &= -Y \pm \sqrt{(Y+1)^2 - \xi(1+4Y)} \\ (C+Y)^2 &= (Y+1)^2 - \xi(1+4Y) \end{aligned}$$

Despejando ξ resulta

$$\xi = (1-C) \frac{1+C+2Y}{1+4Y} \tag{4.19}$$

Que es finalmente la relación de dispersión para el interior de cualquier cadena, que nos interesa graficar e interpretar físicamente, además graficaremos $\xi = \xi(Y)$ ya que se desean encontrar contornos con C fijo.

Analizando la ecuación (4.19), vemos que es necesario tomar valores seleccionados de C para poder interpretar la gráfica, por lo tanto, si hacemos $C = 1$, ó $C = -1$ obtendremos las fronteras de las curvas que separan las partes real e imaginaria pura, esto es:

Si $C = 1$ entonces:

$$(1 + 4Y)\xi = 0 \rightarrow \xi = 0 \text{ ó } Y = -\frac{1}{4}$$

Si $C = -1$ resulta:

$$\xi = \frac{4Y}{1 + 4Y} \rightarrow \simeq 1 \quad (4.20)$$

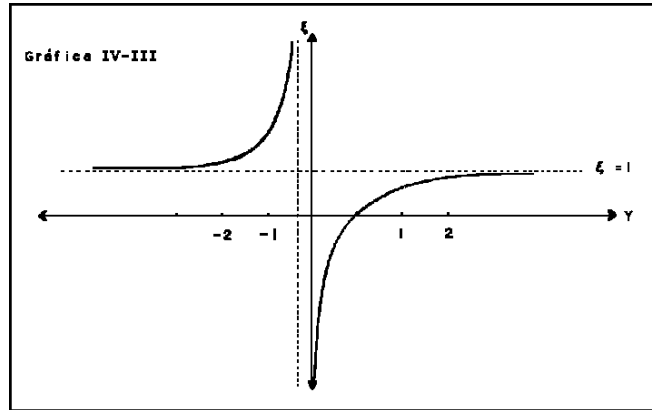
Debido a que $0 \leq \xi \leq 1$, entonces puede ser que la ξ dada por (4.19) se escape de los límites, por lo tanto es necesario analizar su comportamiento gráficamente. De (4.19) resulta:

Si $Y \rightarrow 0$ entonces $\xi \rightarrow 1$

Si $Y = 0$ entonces $\xi = 0$

En $Y = -\frac{1}{4}$ resulta que $\xi = \infty$ que es un polo.

Por lo tanto con estos elementos podemos graficar la ecuación (4.19) esto es:



Prosiguiendo el análisis de la ecuación (4.18). Si $C = 0$ entonces

$$\xi = \frac{1 + 2Y}{1 + 4Y} \rightarrow \simeq \frac{1}{2}$$

Cuando $C > 0$, entonces como $0 \leq \xi \leq 1$ necesariamente $Y > 0$, pero cuando $Y < 0$, las condiciones varían ligeramente.

En $C = -\frac{1}{2}$ existe una línea crítica ya que

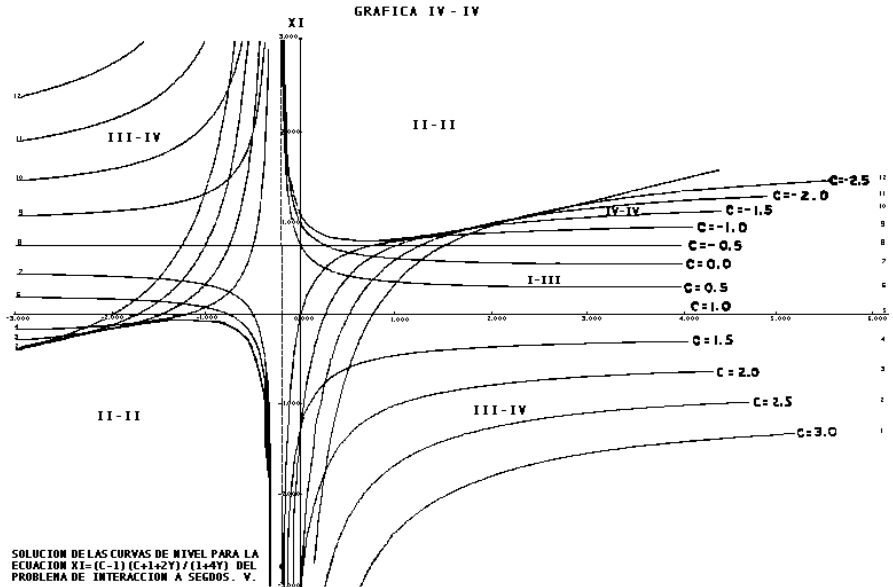
$$\xi = (1 + 1/2) \frac{1 - 1/2 + 2Y}{1 + 4Y} = .75$$

En $Y = 0$ la relación entre ξ y C es:

$$\xi = 1 - C^2, \text{ por lo tanto } C = \pm\sqrt{1 - \xi}$$

lo cual quiere decir que hay siempre dos valores de C para cualquier ξ que esté en el intervalo $0 \leq \xi \leq 1$, tal que C está en el intervalo $-1 \leq C \leq 1$. En otra región, por supuesto que también dos valores reales para C , pero necesariamente ambas estarán situadas en el intervalo (esto es $-1 \rightarrow 1$).

Por lo tanto, como las gráficas (IV.II) y (IV.III) pertenecen a la misma ecuación, deducidas únicamente con análisis diferentes, entonces podemos superponerlas y formar una sola, juntamente con los resultados del análisis de dicha ecuación (4.18), esto es



Analizando esta gráfica, junto con las ecuaciones (4.18) y (2.20) resultan las siguientes regiones características:

Región I. Se encuentra en $-1 \leq C \leq 1$, esta es una región en donde el número de onda (μ) es un número complejo con parte real cero, en este caso el movimiento de la cadena es ondulatorio, ya que resulta una función senosoidal o cosenoidal.

Región II. Está limitada por dos curvas asintóticas, descritas anteriormente (gráfica IV.II) correspondiente a la ecuación $\xi(Y+1)^2/(1+4Y)$. Es una región de μ complejo, por lo tanto tenemos una onda modulada por un factor exponencial que depende de la parte real de ϕ , este factor no es otra cosa que la amplitud, que nos va a modular las funciones seno o coseno.

Región III. Esta región corresponde a valores de $C > 1$, en esta región el número de onda es real positivo o negativo, por lo tanto el movimiento de las partículas en la cadena estará descrito por una exponencial creciente o decreciente dependiendo de que $\phi > 1$ ó $\phi < 1$.

Región IV. Se encuentra localizada en donde C toma valores reales negativos (en la gráfica corresponde a $-2.0 \leq C \leq -0.5$) este caso se cumple cuando $\phi = \alpha + i\pi$ dando

como resultado que $\mu = -e^\alpha$ por lo tanto en este caso se observarán oscilaciones con inversiones de fase, producidas por un desfaseamiento de 180° , este caso tiene que ver con el hecho de que exista cooperación o antagonismo entre primeros y segundos vecinos.

Anteriormente vimos que las raíces ocurren en parejas recíprocas por lo tanto en la gráfica IV.IV la interpretación que se le da a cada punto, es que está representando por la intercepción de dos ondas, esto es el movimiento está representado por dos ondas que viajan en direcciones opuestas, entonces vemos el porque en la gráfica (IV.IV) aparecen las superposiciones de dos tipos de ondas.

4.4 Análisis de la región compleja de la relación de dispersión.

Ahora queremos encontrar una ecuación analítica que nos describa la región compleja (Región II), de la gráfica (IV.IV).

Partiendo de la relación de dispersión descrita por (2.21), esto es:

$$\mu^4 - \gamma\mu^3 - \beta\mu^2 - \gamma\mu + 1 = 0 \quad (4.21)$$

en donde hemos empleado las definiciones siguientes, descritas con anterioridad.

$$\begin{cases} \gamma &= -\frac{a_1}{a_2} = -4Y \\ a_0 &= -2(a_1 + a_2) \\ \beta &= \frac{\lambda - a_0}{a_2} \end{cases} \quad (4.22)$$

Dividiendo por $\mu^2 (\neq 0)$ la relación de dispersión, obtenemos

$$\left(\mu^2 + \frac{1}{\mu^2}\right) - \gamma\left(\mu + \frac{1}{\mu}\right) - \beta = 0$$

completando un binomio cuadrado perfecto, en el primer término.

$$\left(\mu + \frac{1}{\mu}\right)^2 - \gamma\left(\mu + \frac{1}{\mu}\right) - (\beta + 2) = 0$$

Es conveniente reintroducir

$$C = \cosh \phi = \frac{1}{2}\left(\mu + \frac{1}{\mu}\right)$$

que al sustituirlo en la ecuación anterior resulta

$$4C^2 - 2\gamma C - (\beta + 2) = 0$$

finalmente es deseable expresar β en términos de la frecuencia, por lo cual, trabajando en las ecuaciones (4.22) obtenemos

$$\begin{aligned} \beta &= \frac{\lambda + 2(a_1 + a_2)}{a_2} \\ &= \frac{\lambda}{a_2} + 2(1 - \gamma) \end{aligned} \quad (4.23)$$

sin embargo, nosotros hemos normalizado la frecuencia por medio del intervalo de Gerschoring, usando como parametro ξ , es decir

$$\xi = -\frac{\lambda}{4(a_1 + a_2)}$$

Con lo que:

$$\lambda = -4\xi(a_1 + a_2)$$

bajo estas consideraciones (4.23), se transforma en

$$\begin{aligned}\beta &= \frac{-4\xi(a_1 + a_2)}{a_2} + 2(1 - \gamma) \\ &= 2(1 - \gamma)(1 - 2\xi)\end{aligned}$$

sustituyendo todo esto en la relación de dispersión resulta

$$2C^2 - \gamma C - [(1 - \gamma)(1 - 2\xi) + 1] = 0$$

Poniendo finalmente γ en términos de Y

$$2C^2 - 4YC - [(1 - 4Y)(1 - 2\xi) + 1] = 0$$

Por lo tanto tenemos una expresión para C en términos de los parámetros Y y ξ esto es

$$\begin{aligned}C &= \frac{-4Y \pm \sqrt{16Y^2 + 4 \cdot 2 \cdot [(1 + 4Y)(1 - 2\xi) + 1]}}{2 \cdot 2} \\ &= -Y \pm \sqrt{(Y + 1)^2 - \xi(1 + 4Y)}\end{aligned}\quad (4.24)$$

Como sabemos, C puede ser real o complejo. Cuando es real los valores críticos son $C = \pm 1$, que ya han sido analizados, lo que interesa estudiar ahora es la región en que C llega a ser compleja; cuando es compleja, la parte real es $-Y$ y la parte imaginaria es $\sqrt{\xi(1 + 4Y) - (Y + 1)^2}$, desde luego que el único camino de que un número complejo sea tal, es de que su radical sea negativo. Por otra parte queremos trabajar con C complejo, por lo cual definamos

$$\begin{aligned}C = \cosh \phi &= \cosh(\alpha + i\beta) \\ &= \cosh \alpha \cosh \beta + i \sinh \alpha \sinh \beta = a + ib\end{aligned}\quad (4.25)$$

En donde:

$$\begin{aligned}a &= \cosh \alpha \cosh \beta \\ b &= \sinh \alpha \sinh \beta\end{aligned}$$

Entonces

$$\begin{aligned}a^2 &= \cosh^2 \alpha \cosh^2 \beta = \cosh^2 \alpha (1 - \sinh^2 \beta) = \cosh^2 \alpha - \cosh^2 \alpha \sinh^2 \beta \\ b^2 &= \sinh^2 \alpha \sinh^2 \beta = (\cosh^2 \alpha - 1) \sinh^2 \beta = -\sinh^2 \beta + \cosh^2 \alpha \sinh^2 \beta\end{aligned}$$

Despejando de estas dos ecuaciones $\text{sen}^2 \beta$ e igualando resulta

$$\frac{b^2}{\cosh^2 \alpha - 1} = \frac{\cosh^2 \alpha - a^2}{\cosh^2 \alpha}$$

llamando a $x = \cosh^2 \alpha$ a resulta

$$b^2 x = (x - 1)(x - a^2)$$

Que resolviendo para x resulta

$$x = \frac{a^2 + b^2 + 1 \pm \sqrt{(a^2 + b^2 + 1)^2 - 4a^2}}{2} \quad (4.26)$$

Además como hemos definido $C = a + ib$, de (4.24) resulta que

$$\left\{ \begin{array}{l} a = -Y \\ b = \sqrt{\xi(1 + 4Y) - (Y + 1)^2} \end{array} \right\} \quad (4.27)$$

Ahora vamos a encontrar la forma explícita en términos de ξ ; Y y del discriminante de x , esto es.

$$a^2 + b^2 + 1 = Y^2 + [\xi(1 + 4Y) - Y^2 - 2Y - 1] + 1 = \xi(1 + 4Y) - 2Y$$

O sea que el discriminante total tiene la forma

$$\begin{aligned} (a^2 + b^2 + 1) - 4a^2 &= [\xi(1 + 4Y) - 2Y]^2 - 4Y^2 \\ &= \xi(1 + 4Y)(\xi + 4\xi Y - 4Y) \end{aligned} \quad (4.28)$$

Desde luego que esto no tiene la apariencia de un cuadrado perfecto por lo tanto no es posible eliminar el radical, para hacerlo tomemos la expresión para x dada por (4.26), junto con las dos ecuaciones anteriores y la misma definición de x , esto es

$$\begin{aligned} [2 \cosh^2 \alpha + 2Y - \xi(1 + 4Y)]^2 &= \xi^2(1 + 4Y)^2 - 4\xi Y(1 + 4Y) \\ (Y + \cosh^2 \alpha)^2 &= \xi(1 + 4Y) \cosh^2 \alpha \end{aligned}$$

Despejando finalmente ξ tenemos

$$\xi = \frac{(Y + \cosh^2 \alpha)^2}{(1 + 4Y) \cosh^2 \alpha} \quad (4.29)$$

En forma similar

$$\begin{aligned} \cosh^2 \alpha &= \frac{a^2}{1 - \text{sen}^2 \beta} \\ \cosh^2 \alpha &= \frac{b^2}{\text{sen}^2 \beta} + 1 \end{aligned}$$

Así que

$$\frac{a^2}{1 - \text{sen}^2 \beta} = \frac{b^2 + \text{sen}^2 \beta}{\text{sen}^2 \beta}$$

Para simplificar el álgebra llamemos $x = \sin^2 \beta$, entonces

$$xa^2 = (b^2 + x)(1 - x)$$

Resolviendo para x , resulta

$$x = \frac{-(a^2 + b^2 - 1) \pm \sqrt{(a^2 + b^2 - 1)^2 + ab^2}}{2} \quad (4.30)$$

Calculemos el discriminante en términos de ξ y Y , definidos por (4.27)

$$\begin{aligned} 1 - a^2 - b^2 &= 1 - Y^2 - [\xi(1 + 4Y) - (Y + 1)^2] \\ -(a^2 + b^2 - 1) &= 2 + 2Y - \xi(1 + 4Y) \end{aligned} \quad (4.31)$$

Por lo cual el radical tiene la forma

$$\begin{aligned} (a^2 + b^2 - 1)^2 + 4b^2 &= [2 + 2Y - \xi(1 + 4Y)]^2 + 4[\xi(1 + 4Y) - (Y + 1)^2] \\ &= \xi^2(1 + 4Y)^2 - 4Y\xi(1 + 4Y) \\ &= \xi(1 + 4Y)(\xi + 4\xi Y - 4Y) \end{aligned} \quad (4.32)$$

Como vemos obtenemos un resultado bastante curioso, ya que resulta la misma expresión obtenida al determinar la dependencia en $\cosh \alpha$ (ec. 4.28). Otra vez no hemos podido obtener, un cuadrado perfecto por lo cual racionalizamos la definición original de x , es decir, de la ecuación (4.30) tenemos

$$2 \sin^2 \beta = -(a^2 + b^2 - 1) + \sqrt{(a^2 + b^2 - 1)^2 + 4b^2}$$

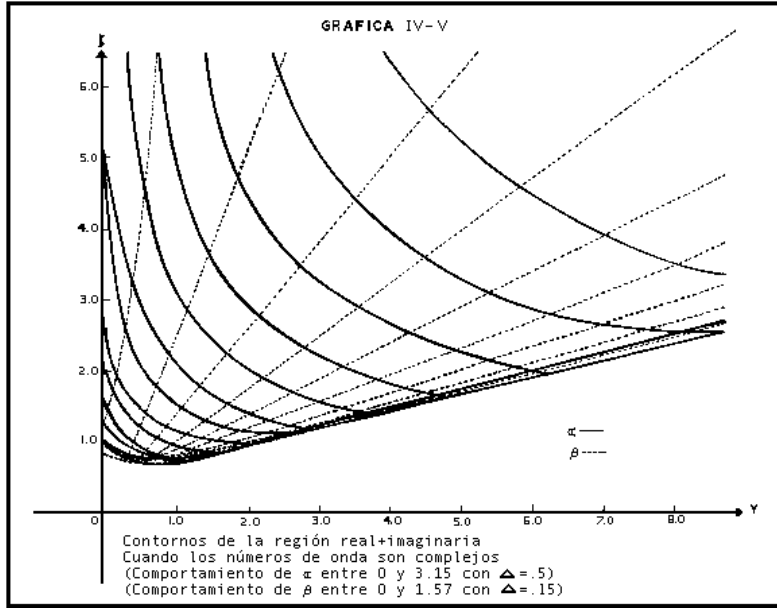
Sustituyendo las ecuaciones (4.31) y (4.32) resulta

$$\begin{aligned} [2 \sin^2 \beta - 2 - 2Y + \xi(1 + 4Y)]^2 &= \xi^2(1 + 4Y)^2 - 4Y\xi(1 + 4Y) \\ (Y + \cos^2 \beta)^2 &= \cos^2 \beta \xi(1 + 4Y) \end{aligned}$$

despejando finalmente ξ , resulta

$$\xi = \frac{(Y + \cos^2 \beta)^2}{(1 + 4Y) \cos^2 \beta} \quad (4.33)$$

Con objeto de visualizar mejor el comportamiento de la región compleja, supongamos las gráficas de las ecuaciones (4.29) y (4.33), con lo que resulta la gráfica IV.V, en donde las líneas llenas nos representan el comportamiento de la ecuación (4.29) que resulta ser una familia de hipérbolas y las líneas punteadas nos representan el comportamiento de (4.33) al comparar esta gráfica con la (IV.IV) vemos que concuerda con la forma de la región compleja, esto es, región II-II.



4.5 Evaluación de $T^{(n)}$ y $x(\xi, y)$ usando parámetros.

Ahora queremos una nueva representación para poder calcular el polinomio característico $x(\lambda, Y)$, con lo cual podemos calcular la matriz $T^{(n)}$ para esto es necesario poner los elementos de la matriz de transferencia en términos de los parámetros Y y ξ definidos por (4.1) y (4.2) respectivamente.

Con esta notación resulta:

$$\begin{aligned} \gamma &= \alpha = -4Y \\ \beta &= (4Y + 1)(2 - 4\xi) \\ \delta &= -1 \end{aligned} \quad (4.34)$$

Por lo tanto la matriz de transferencia resulta de la forma:

$$T = \begin{bmatrix} -4Y & 2(4Y + 1)(1 - 2\xi) & -4Y & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.35)$$

Empleando la ecuación (4.7) para el polinomio característico de T en función de sus raíces resulta

$$x(\varepsilon, \xi) = (\mu^2 - 2\mu \cosh \phi_1 + 1)(\mu^2 - 2\mu \cosh \phi_2 + 1) \quad (4.36)$$

En donde:

$$\cosh \phi_1 = a = \frac{1}{2} \left(\varepsilon + \frac{1}{\varepsilon} \right)$$

$$\cosh \phi_2 = b = \frac{1}{2}\left(\xi + \frac{1}{\xi}\right)$$

efectuando el producto indicado en (4.36) resulta

$$x(\varepsilon, \xi) = \mu^4 - 2\mu^3(\cosh \phi_1 + \cosh \phi_2) + \mu^2(2 + 4 \cosh \phi_1 \cosh \phi_2) - 2\mu(\cosh \phi_1 + \cosh \phi_2) + 1$$

Comparando esta última ecuación, con la ecuación (4.6) junto con los parámetros dados por (4.34) resulta

$$\begin{aligned} 4Y &= -2(\cosh \phi_1 + \cosh \phi_2) \\ Y &= -\frac{1}{2}(\cosh \phi_1 + \cosh \phi_2) \end{aligned} \quad (4.37)$$

Comparando el coeficiente de μ^2 resulta

$$\begin{aligned} 2(1 + 2 \cosh \phi_1 \cosh \phi_2) &= -2(4Y + 1)(1 - 2\xi) \\ 1 + 2 \cosh \phi_1 \cosh \phi_2 &= -(1 - 2\xi)(1 + 4Y) \end{aligned} \quad (4.38)$$

Comparando el coeficiente de μ resulta:

$$\begin{aligned} -4Y &= 2(\cosh \phi_1 + \cosh \phi_2) \\ \cosh \phi_1 &= -2Y - \cosh \phi_2 \end{aligned} \quad (4.39)$$

Por otra parte anteriormente definimos que $\cosh \phi = C$, por analogía definamos:

$$\cosh \phi_1 = C_1 \quad \text{y} \quad \cosh \phi_2 = C_2 \quad (4.40)$$

Usando la ecuación (4.38), junto con las ecuaciones (4.39) y (4.40) resulta:

$$1 + 2C_1(-2Y - C_1) = -(1 - 2\xi)(1 + 4Y)$$

Solucionando para C_1 tenemos

$$C_1 = -Y \pm \sqrt{Y^2 + \frac{1}{2}[1 + (1 - 2\xi)(1 + 4Y)]}$$

Y reduciendo términos en el radicando resulta:

$$\begin{aligned} C_1 &= -Y + \sqrt{(Y + 1)^2 - \xi(1 + 4Y)} \\ C_2 &= -Y - \sqrt{(Y + 1)^2 - \xi(1 + 4Y)} \end{aligned} \quad (4.41)$$

En términos de las ecuaciones dadas por (4.41), podemos evaluar $T^{(n)}$ por lo tanto $x(\xi, Y)$. Además este sistema de coordenadas lo utilizamos para graficar el espectro de frecuencias obtenido a partir de la condición de que el menor de la matriz $T^{(n)}$ es cero, esto es:

$$T_{11}^{(m)} = \begin{vmatrix} q_{11}(\lambda) & q_{12}(\lambda) \\ q_{21}(\lambda) & q_{22}(\lambda) \end{vmatrix} = 0$$

4.6 Espectro de frecuencias en función de los polinómios de Tchebychev.

Por lo tanto lo que queremos evaluar es la forma explícita de la ecuación de eigenvalores, para lo cual es necesario el cálculo de los elementos de la matriz $T_{11}^{(n)}$. Empleando la notación usada para deducir la ecuación (3.14) esto es:

$$Q^m = \sum_{i=1}^n \{ \sinh(m+1)\phi_i - T^{-1} \sinh m \phi_i \} \frac{Y_i}{\sinh \phi_i}$$

Se tiene que

$$\begin{aligned} & \sinh(m+1)\phi_i - T^{-1} \sinh m \phi_i = \\ & = \begin{bmatrix} \sinh(m+1)\phi_i & -\sinh m \phi_i & 0 & 0 \\ 0 & \sinh(m+1)\phi_i & -\sinh m \phi_i & 0 \\ 0 & 0 & \sinh(m+1)\phi_i & -\sinh m \phi_i \\ \sinh m \phi_i & -\gamma \sinh m \phi_i & -\beta \sinh m \phi_i & \sinh(m+1)\phi_i - \gamma \sinh m \phi_i \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (4.42)$$

Para el caso de vibraciones a segundos vecinos, únicamente vamos a tener el desarrollo para dos términos, como vimos anteriormente por lo tanto de la fórmula para Q^m .

$$T^m = \{ \sinh(m+1)\phi_1 - T^{-1} \sinh m \phi_1 \} \frac{\gamma_1}{\sinh \phi_1} + \{ \sinh(m+1)\phi_2 - T^{-1} \sinh m \phi_2 \} \frac{\gamma_2}{\sinh \phi_2} \quad (4.43)$$

En donde

$$\begin{aligned} \gamma_1 &= \frac{[\cosh \Phi - II \cosh \phi_2]}{[\cosh \phi_1 - \cosh \phi_2]} \\ \gamma_2 &= \frac{[\cosh \Phi - II \cosh \phi_1]}{[\cosh \phi_1 - \cosh \phi_2]} \end{aligned} \quad (4.44)$$

Además habíamos definido anteriormente (ec. 3.14) que

$$\cosh \Phi = \frac{1}{2}(Q + Q^{-1})$$

Que en forma matricial, se puede escribir como

$$\cosh \Phi = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \gamma & \beta + 1 & \gamma & -1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ -1 & \gamma & \beta + 1 & \gamma \end{bmatrix}$$

Por lo tanto los operadores de proyección γ_1 y γ_2 quedan finalmente como

$$\gamma_1 = \frac{1}{\cosh \phi_1 - \cosh \phi_2} \begin{bmatrix} \cosh \phi_1 & -\frac{1}{2} - 2 \cosh \phi_1 \cosh \phi_2 & \cosh \phi_1 + \cosh \phi_1 & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\cosh \phi_2 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & -\cosh \phi_2 & \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \cosh \phi_1 + \cosh \phi_2 & -\frac{1}{2} - 2 \cosh \phi_1 \cosh \phi_2 & \cosh \phi_1 \end{bmatrix}$$

$$\gamma_2 = \frac{-1}{\cosh \phi_1 - \cosh \phi_2} \begin{bmatrix} \cosh \phi_2 & -\frac{1}{2} - 2 \cosh \phi_1 \cosh \phi_2 & \cosh \phi_1 + \cosh \phi_2 & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\cosh \phi_1 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & -\cosh \phi_1 & \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \cosh \phi_1 + \cosh \phi_2 & -\frac{1}{2} - 2 \cosh \phi_1 \cosh \phi_2 & \cosh \phi_2 \end{bmatrix}$$

Si sustituimos en la ecuación (4.43) la forma matricial de los operadores γ_1 y γ_2 junto con las ecuaciones dadas por (4.42), obtendremos finalmente $T^{(m)}$ y por lo consiguiente la forma explícita de la ecuación de eigenvalores, que está dada por el menor de la matriz $T^{(m)}$, con objeto de reducir el álgebra escribiremos únicamente el cofactor 2×2 de la esquina superior izquierda, esto es:

$$T^{(m)} = \frac{1}{\sinh \phi_1 (\cosh \phi_1 - \cosh \phi_2)} \cdot$$

$$\begin{bmatrix} \sinh(m+1)\phi_1 \cosh \phi_1 - \frac{1}{2} \sinh m \phi_1 & \sinh(m+1)\phi_1 [-\frac{1}{2} - 2 \cosh \phi_1 \cosh \phi_2] + \sinh m \phi_1 \cosh \phi_2 & \vdots \\ \frac{1}{2} \sinh(m+1)\phi_1 & -\sinh(m+1)\phi_1 \cosh \phi_2 - \frac{1}{2} \sinh m \phi_1 & \vdots \\ \dots & \dots & \vdots \\ \dots & \dots & \vdots \end{bmatrix} +$$

$$+ \frac{-1}{\sinh \phi_2 (\cosh \phi_1 - \cosh \phi_2)} \cdot$$

$$\begin{bmatrix} \sinh(m+1)\phi_2 \cosh \phi_2 - \frac{1}{2} \sinh m \phi_2 & \sinh(m+1)\phi_2 [-\frac{1}{2} - 2 \cosh \phi_1 \cosh \phi_2] + \sinh m \phi_2 \cosh \phi_1 & \dots \\ \frac{1}{2} \sinh(m+1)\phi_2 & -\sinh(m+1)\phi_2 \cosh \phi_2 - \frac{1}{2} \sinh m \phi_2 & \dots \\ \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{bmatrix} \quad (4.45)$$

Por lo tanto tenemos finalmente los elementos del menor $T_{11}^{(m)}$ los cuales son:

$$q_{11} = \frac{1}{(\cosh \phi_1 - \cosh \phi_2)} \left\{ \frac{\sinh(m+1)\phi_1 \cosh \phi_1 - \frac{1}{2} \sinh m \phi_1}{\sinh \phi_1} - \frac{\sinh(m+1)\phi_2 \cosh \phi_2 - \frac{1}{2} \sinh m \phi_2}{\sinh \phi_2} \right\}$$

$$q_{21} = \frac{1}{(\cosh \phi_1 - \cosh \phi_2)} \left\{ \frac{\sinh(m+1)\phi_1}{2 \sinh \phi_1} - \frac{\sinh(m+1)\phi_2}{2 \sinh \phi_2} \right\} \quad (4.46)$$

$$q_{22} = \frac{1}{(\cosh \phi_1 - \cosh \phi_2)} \left\{ \frac{-\sinh(m+1)\phi_1 \cosh \phi_2 - \frac{1}{2} \sinh m \phi_1}{\sinh \phi_1} + \frac{\sinh(m+1)\phi_2 [-\cosh \phi_1 + \frac{1}{2} \sinh m \phi_2]}{\sinh \phi_2} \right\}$$

$$q_{12} = \frac{1}{(\cosh \phi_1 - \cosh \phi_2)} \left\{ \frac{\sinh(m+1)\phi_1 [-\frac{1}{2} - 2 \cosh \phi_1 \cosh \phi_2] + \sinh m \phi_1 \cosh \phi_2}{\sinh \phi_1} + \frac{-\sinh(m+1)\phi_2 [-\frac{1}{2} - 2 \cosh \phi_1 \cosh \phi_2] - \sinh m \phi_2 \cosh \phi_1}{\sinh \phi_2} \right\}$$

Después de cierta álgebra considerable, (ver apéndice C), obtenemos que el espectro de eigenvalores para el interior de cualquier cadena y en particular para una cadena con extremos fijos, que se puede considerar como el interior de una cadena, esta dado por la ecuación determinantal.

$$\begin{vmatrix} f(m+2) & -g(m+2) - f(m+1) \\ f(m+1) & -g(m+1) - f(m) \end{vmatrix} = 0 \quad (4.47)$$

En donde

$$f(m) = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} \sinh m \phi_1 & \sinh m \phi_2 \\ \sinh \phi_1 & \sinh \phi_2 \end{vmatrix} \quad (4.48)$$

$$g(m) = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} \sinh m \phi_1 & \sinh m \phi_2 \\ \sinh 2 \phi_1 & \sinh 2 \phi_2 \end{vmatrix} \quad (4.49)$$

Además un denominador opcional, $\sinh \phi_1 \sinh \phi_2 (\cosh \phi_1 - \cosh \phi_2)$ es disponible.

Si consideramos $f(m)/\sinh \phi_1 \sinh \phi_2$ junto con los polinomios de Tchebychev dados por $U_m(\cos \theta) = \sin(m+1)\theta/\sin \theta$ (en donde si θ es un ángulo tal que $|\cos \theta| > 1$, entonces θ tiene la forma $i\alpha$ ó $\pi + i\alpha$, nosotros podemos emplear la misma notación, desde luego $\cos i\alpha = \cosh \alpha$, $\sin i\alpha = i \sinh \alpha$, y los factores i se cancelan de la ecuación $U_m(\cosh \theta)$, resulta después de cierta álgebra (ver apéndice D) que

$$F(m) = \frac{f(m)}{\sinh \phi_1 \sinh \phi_2} = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} U_m(\phi_1) & U_m(\phi_2) \\ 1 & 1 \end{vmatrix} \quad (4.50)$$

$$= \frac{f(m)}{\sinh \phi_+ \sinh \phi_-} = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} U_m(Z_+) & U_m(Z_-) \\ U_{m-2}(Z_+) & U_{m-2}(Z_-) \end{vmatrix}$$

y

$$G(m) = \frac{g(m)}{\sinh \phi_1 \sinh \phi_2} = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} U_m(Z_1) & U_m(Z_2) \\ U_1(Z_1) & U_1(Z_2) \end{vmatrix} \quad (4.51)$$

$$= \frac{g(m)}{\sinh \phi_+ \sinh \phi_-} = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} U_{m+1}(Z_+) & U_{m-1}(Z_-) \\ U_{m-3}(Z_+) & U_{m-3}(Z_-) \end{vmatrix}$$

Que es precisamente en términos de estas ecuaciones, como se graficó el espectro de eigenvalores dado por la condición de que $T_{11}^{(n)} = O$ como se puede apreciar en la gráfica (IV.V). En esta gráfica se varió Z_1 y Z_2 fijando el valor de m , por lo cual se obtienen contornos de regiones negativas (región estrellada) y positivas (región blanca), en donde la frontera de estas dos regiones nos da la variación de las frecuencias. Esta gráfica como se puede apreciar fácilmente se realizó en un sistema de coordenadas distinto al de la gráfica (IV.IV), pero nos representa la misma información. En el apéndice D se da un ejemplo para $m = 2$ y se obtiene la forma explícita del determinante que se empleó para graficar los polinomios de Tchebychev de argumento variable, esto es:

$$\frac{1}{16(Z_2 - Z_1)^2} \begin{vmatrix} U_{m+3}(Z_2) - U_{m+3}(Z_1) & U_{m+2}(Z_2) - U_{m+2}(Z_1) \\ U_{m+2}(Z_2) - U_{m+2}(Z_1) & U_{m+1}(Z_2) - U_{m+1}(Z_1) \end{vmatrix} = 0 \quad (4.52)$$

Se graficó el espectro de frecuencias para $m = 1, 2, \dots, 10$, usando el sistema de computación IBM-1130, además debido a la complejidad del álgebra fue necesario encontrar una relación de recurrencia para los polinomios de Tchebychev (apéndice E) resultando que el polinomio característico finalmente está dado por

$$x_m(Z_1, Z_2) = -\frac{1}{4} \sum_{k=0}^{m+1} (m+2-k)U_k(Z_1)U_k(Z_2) \quad (4.53)$$



L : 5



L : 6



Capítulo 5

MODELO DEL ANILLO

5.1 Generalidades y condiciones a la frontera.

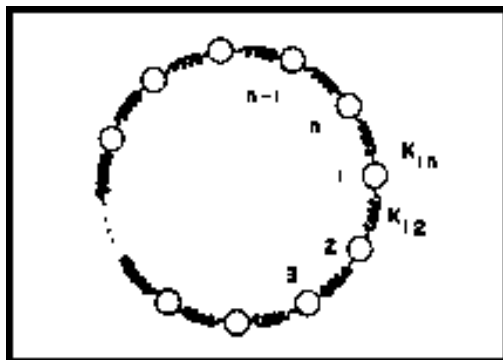
Debido a que este modelo es relativamente fácil, ya que su solución no depende del tipo de interacción que se esté llevando a cabo, entonces analizamos el caso general, pero que nos permite particularizar para el caso de interacciones a segundos vecinos, como se verá posteriormente.

Por lo tanto consideramos un sistema de masas y resortes con n partículas, en el cual exigimos que las amplitudes de las partículas $n + j$ sean cero, (para interacciones a segundos vecinos serán las $n + 1$ y $n + 2$) así como también las de las partículas 0 y -1 , no todos los modos normales cumplirán con tales condiciones, desde luego lo que podría ser esperado, son los ceros en una onda en puntos diametralmente opuestos debido a los requerimientos de simetría.

Por lo tanto nosotros empleamos las condiciones cíclicas a la frontera de Born-Kármán, esto es que:

$$x_{n+j} = x_j \quad \text{y que} \quad k_1 = k_n \neq 0$$

Gráficamente tenemos



Por otra parte, podemos considerar los desplazamientos normales al plano, ya que se

sigue con un problema unidimensional, la ventaja de discutir estos anillos, es que su solución analítica es relativamente fácil, ya que su relación de dispersión, que es lo que interesa obtener en primer lugar, se puede escribir en función de una serie de Fourier y una suma de potencias de cosenos, y más que ésto, podemos encontrar los eigenvalores y eigenvectores en el sentido del número de onda, pero es un poco restringido ya que las soluciones siempre van a salir cosenos y senos, por lo tanto vamos a ver ondas del tipo oscilatorio, ya que la amplitud, no puede aumentar ni disminuir, es decir, es constante, porque cuando iniciamos el ciclo con una amplitud determinada, tenemos forzosamente que llegar a donde iniciamos el ciclo con esa amplitud, entonces el movimiento ondulatorio es el único tipo de movimiento posible, o sea que como modelo no es realista ya que no nos permite obtener las amplitudes de las ondas, pero es conveniente solucionar el sistema por los resultados a que da lugar y también por la perturbación pequeña que se obtiene.

5.2 Matriz de movimiento y relación de dispersión.

La matriz de movimiento que describe el sistema esta dada por:

$$M_c = \begin{bmatrix} a_0 & a_1 & a_2 & a_3 & \cdots & a_{n-1} \\ a_{n-1} & a_0 & a_1 & a_2 & \cdots & a_{n-2} \\ a_{n-2} & a_{n-1} & a_0 & a_1 & \cdots & a_{n-3} \\ \vdots & & & & \ddots & \end{bmatrix}$$

Por lo tanto tenemos un tipo de matrices en cuya forma muy general vemos: La diagonal principal es cíclica con elementos a_0 , la primera diagonal cíclica con elementos a_1 , etc. por lo tanto es un tipo de matriz llamada circulante, además se cumple que $a_i = a_{n-i}$, que es impuesto por las condiciones mecánicas de las redes.

Como vemos la matriz de movimiento M_c es simétrica, que es una consecuencia del problema pero que no va a influir mucho en las consideraciones matemáticas.

Además es fácil ver que la matriz M_c se puede factorizar en la forma:

$$M_c = \begin{bmatrix} a_0 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & a_0 \end{bmatrix} II + \begin{bmatrix} a_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & a_1 \end{bmatrix} II + \cdots$$

y que por lo tanto depende en la matriz S (Ver. Ref.[13]), que tiene como elementos “unos” encima de la diagonal principal y un “uno” en la esquina inferior izquierda y todos los demás elementos cero, esto es

$$S = \begin{bmatrix} 0 & 1 & & & \\ & & 1 & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & \ddots & 1 \\ 1 & & & & & 0 \end{bmatrix}$$

Por otra parte de las propiedades de esta matriz se sabe que:

$$SX = \lambda X$$

tiene como solución

$$\lambda_k = e^{\frac{2\pi i}{N}k} = W^k \quad (5.1)$$

Es decir tiene raíces n -ésimas de “uno” como eigenvalores y los eigenvectores tienen la forma:

$$K = \frac{1}{\sqrt{n}} \begin{bmatrix} 1 \\ W^k \\ W^{2K} \\ \vdots \\ W^{(n-1)k} \end{bmatrix} \quad \text{donde} \quad W = e^{\frac{2\pi i}{N}k}$$

Por lo tanto con esta base, podemos solucionar el problema cíclico que corresponde a un anillo; con estas consideraciones podemos expresar la matriz M_c en la forma:

$$M_c = \sum_{i=0}^{n-1} a_i S^i \quad \text{donde} \quad S^0 = II \quad \text{y} \quad S^n = II \quad (5.2)$$

Entonces las potencias se generan por un ciclo de n 's, todas diferentes, hasta S^n que reproduce S^0 y $S^{n+1} = S^1, \dots$, etc.

Además M_c es una función de S , y cualquier función de S se puede escribir, utilizando un teorema visto con anterioridad en la forma

$$f(S) = \sum_{i=1}^n f(\lambda_i) |i\rangle\langle i| \quad (5.3)$$

donde $|i\rangle\langle i|$ es el operador de proyección que es el producto exterior de los eigenvectores y además los eigenvalores de M_c están dados por

$$f(\lambda) = \sum_{i=0}^{n-1} a_i \lambda^i \quad (5.4)$$

Ahora sabemos que, λ^i está dada explícitamente como una exponencial (ec. 5.1), que la matriz es simétrica, lo cual nos permite determinar los eigenvalores de M_c y que los eigenvalores de una función matricial, son las mismas funciones de los eigenvalores de la matriz original, entonces en lugar de la matriz tenemos que sustituir los eigenvalores esto es:

$$f(\lambda_k) = \sum_{i=0}^n a_i \lambda_k^i$$

Además como $\lambda_k = W^k$ que corresponde al eigenvalor número k , tenemos

$$f(W^k) = a_0 II + \sum_{i=1}^{n/2} a_i (W^{ki} + W^{-ki}) + \frac{a_n}{2} W^{\frac{kn}{2}} \quad (5.5)$$

En donde $n/2$ es el entero más cercano y el último término ocurre cuando λ es par, por ejemplo si la matriz es de orden 6 tenemos

$$\begin{aligned} f(W) &= a_0 II + a_1 S^1 + a_1 S^{-1} + a_2 S^2 + a_2 S^{-2} + a_3 S^3 \\ &= a_0 II + a_1 (S + S^{-1}) + a_2 (S^2 + S^{-2}) + a_3 S^3 \end{aligned}$$

En donde vemos que sobra el término $a_3 S^3$ que corresponde al último término de (5.5), además el exponente está elevado a la dimensión de la matriz sobre dos; por lo tanto existe una diferencia entre casos pares e impares que esta dado por el último término.

Calculemos:

$$W^{kj} - W^{-kj} = e^{\frac{2\pi i}{N}kj} + e^{-\frac{2\pi i}{N}kj} = 2 \cos \frac{2\pi}{N}kj$$

y sustituyendolo en (5.5) resulta:

$$f(W^k) = a_0 II + 2 \sum_{i=1}^{n/2} a_i \cos \frac{2\pi}{N}ik + \frac{a_n}{2} e^{\frac{2\pi i}{N}kN} \quad (5.5')$$

Además como

$$e^{\frac{2\pi i}{N}kN} = (-1)^k$$

Por lo tanto resulta finalmente que

$$f(W^k) = a_0 II + 2 \sum_{i=1}^{n/2} a_i \cos \frac{2\pi}{N}ik + \frac{a_n}{2} [(-1)^k]$$

Que es la ley de dispersión, que da la frecuencia (al cuadrado) como función del número de onda k .

Para el caso de interacciones a segundos vecinos tenemos que $n = 2$

$$f(W^k) = f(\lambda_k) = a_0 + 2a_1 \cos \frac{2\pi k}{N} + 2a_2 \cos \frac{2\pi}{N} \cdot 2k$$

Además como en problemas mecánicos se cumple que

$$a_0 + 2a_1 + 2a_2 = 0 \quad \text{y además como} \quad \cos 2\theta = 2 \cos^2 \theta - 1$$

Resulta.

$$f(\lambda_k) = -2a_1 \left(1 - \cos \frac{2\pi k}{N}\right) - 4a_2 \left(1 - \cos^2 \frac{2\pi k}{N}\right) \quad (5.6)$$

Expresando esta ecuación, con los mismos términos empleados en el caso del interior de cualquier cadena, esto es:

$$\xi = \frac{-\lambda}{4(a_1 + a_2)} \quad \text{y} \quad Y = \frac{a_1}{4a_2}$$

tendremos

$$f(\lambda_k) = -4\xi(a_1 - a_2)$$

con lo cual de (5.6) resulta que

$$-4\xi(a_1 - a_2) = -2a_1 \left(1 - \cos \frac{2\pi k}{N}\right) - 4a_2 \left(1 - \cos^2 \frac{2\pi k}{N}\right)$$

dividiendo entre $-4a_2$ y despejando ξ resulta que

$$\xi = \frac{(1 - \cos^2 \frac{2\pi k}{N}) + 2Y(1 - \cos \frac{2\pi k}{N})}{4Y + 1}$$

y definiendo $C = \cos \frac{2\pi k}{N}$ resulta finalmente que

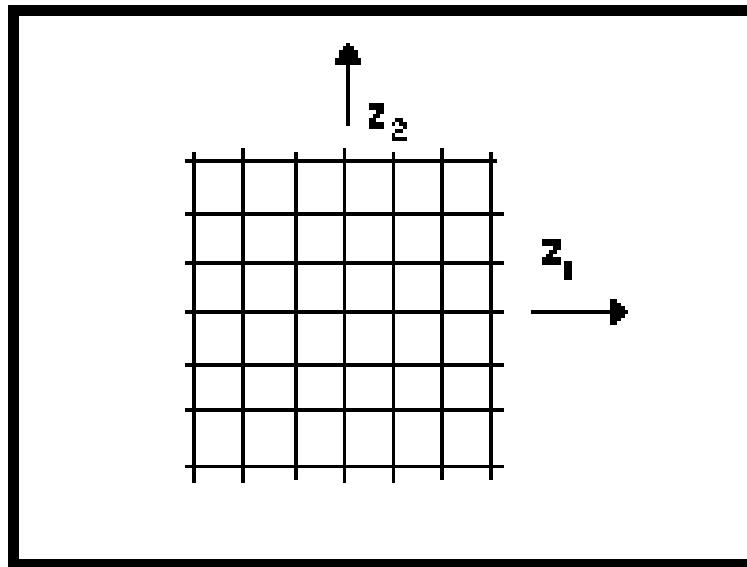
$$\xi = (1 - c) \frac{1 + C + 2Y}{1 + 4Y} \quad (5.7)$$

Que es exactamente la relación de dispersión para el interior de cualquier cadena, la única diferencia en la obtención de esta ecuación con respecto a la primera, es que ésta tiene como eigenvalores.

$$\mu = e^{\frac{2\pi i}{N} \cdot k}$$

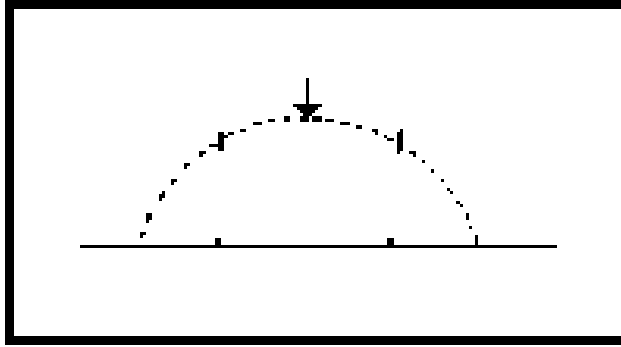
5.3 Comparación de los resultados con el interior de una cadena y conclusiones.

La gráfica de la relación (5.7) está dada por (IV.IV), en esa gráfica vemos que los eigenvalores caen sobre las líneas de "C" constante. Esto es porque el anillo necesita una condición de periodicidad, así que únicamente ciertos números de onda son permitidos (esto es, números de onda que corresponden a ondas oscilatorias). Además en este modelo vemos que habrán ciertas degeneraciones; donde las ondas de dos números de onda diferentes pueden tener las mismas frecuencias. En el plano $Z_1 - Z_2$ esos forman una red determinada por los ceros de los polinomios de Tchebychev esto es:



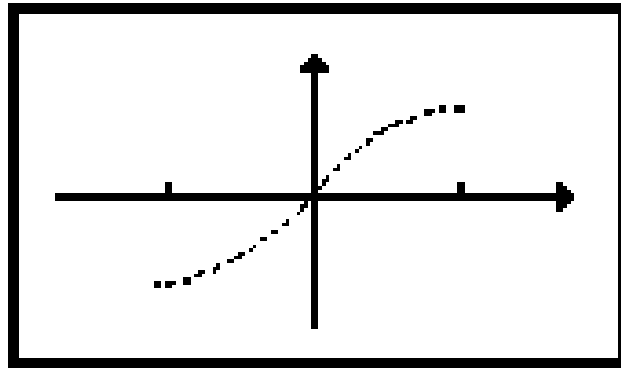
Además es necesario investigar si combinaciones lineales de esas ondas degeneradas tienden a desvanecerse sobre un par diametralmente opuesto de puntos.

Desde luego podemos escoger la fase de cada onda degenerada como se desee, podemos hacer que tengan un máximo entre las dos partículas nodales. Entonces por simetría, los desplazamientos de las dos partículas serán iguales.



Para la otra onda degenerada haremos lo mismo, y por lo tanto ahora es un asunto sencillo encontrar los coeficientes para los cuales la suma se desvanece en ambos puntos.

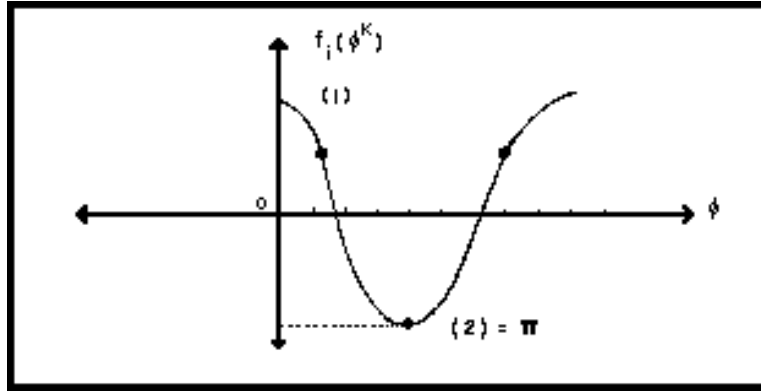
En seguida hagamos la selección de tal forma de que los nodos caigan entre las partículas nodales. Esta vez las partículas tienen desplazamientos opuestos por simetría, esto es:



Una selección similar de fase para la segunda onda, permitirá otra vez una combinación lineal que se anule en las partículas nodales. Claramente esas dos construcciones, admiten modos normales independientes y por lo tanto tenemos una variedad bidimensional de ondas degeneradas, que se anulan en las partículas nodales, para el puro anillo tendremos una variedad tetradimensional, desde luego no existe restricción sobre la fase de una onda ni de su relación de amplitudes.

Una forma de comprobar lo anterior se puede ver analizando la relación de dispersión para un anillo, esto es, ecuación (5.5'), que nos da eigenvalores de M_c expresadas por una serie de cosenos, por otra parte este es un caso de interés, ya que una matriz simétrica debe tener eigenvalores reales y los obtenidos aquí son complejos, pero esta ambigüedad se anula por un análisis gráfico del coseno que resulta en (5.5'), esto es, vamos a obtener $f(w^k)$, como está dado en función de una suma tenemos que dividir el intervalo entre 0 y 2π y éste dividirlo en intervalos; de tal forma que si $i = 1$ entonces $k = 0, 1, 2, \dots$, se encuentre en el intervalo $0 \leq k \leq N$, lo cual quiere decir que el coseno dado por (5.5'), se encuentra entre 0 y 2π al

menos cuando $i = 1$, por lo tanto la gráfica del coseno tendrá la forma siguiente:



En donde hemos evaluado su argumento definido como $\theta = \frac{2\pi i}{N}k$ por lo tanto hay que ver en cada uno de los puntos, el valor de esta función, lo importante es que, como este subintervalo lo hemos dividido en una manera simétrica regular, entonces para cada valor de un lado tenemos su correspondiente simétrico en el otro lado, lo cual quiere decir que para k y $n - k$ la función siempre toma el mismo valor, por lo tanto tenemos que el coseno tiene una simetría por reflexión respecto a π , entonces esto nos permite suponer que

$$f(W^k) = f(W^{-k})$$

Ya que es posible suponer que $-k = n - k$, entonces casi siempre existe una degeneración doble, y no existirá degeneración doble cuando n es impar, en cuyo caso vemos el punto π en un punto de subdivisión es decir vemos un sólo valor y esto corresponde el caso cuando se involucra el último término de la ecuación (5.5).

Otro caso es que excluimos los puntos (1) y (2) de la gráfica por lo tanto, los puntos donde el coseno alcanza a sus extremos que corresponden a -1 y 1 no ocurren dobles, éstos corresponden al eigenvector de componentes 1 's y al término $a_n/2$, porque en este caso tendremos valores de la forma $1, -1, 1, -1, \dots$ que ya son reales completamente, por lo tanto podemos formar combinaciones entre el vector k y el $-k$, con lo cual podemos construir

$$K = \frac{1}{\sqrt{n}} \begin{bmatrix} 1 \\ W^k \\ W^{2k} \\ \vdots \\ W^{(n-1)k} \end{bmatrix} \pm \begin{bmatrix} 1 \\ W^{-k} \\ W^{-2k} \\ \vdots \\ W^{-(n-1)k} \end{bmatrix}$$

Con esto podemos formar el vector siguiente:

$$\begin{bmatrix} \cos \frac{2\pi}{N}k.0 \\ \cos \frac{2\pi}{N}k.1 \\ \cos \frac{2\pi}{N}k.2 \\ \vdots \end{bmatrix}$$

En donde $0, 1, \dots$ son coordenadas espaciales, además podemos construir otro con componentes senos, también es posible construir uno con la parte imaginaria y otro con la real correspondiente al eigenvalor complejo.

Por lo tanto este es un aspecto del problema de un anillo, en el cual siempre existe degeneración doble, con excepción de las dos frecuencias extremas.

Además podemos ver, que para el caso en que n es más grande, se obtiene el mismo resultado, entonces no importa a que número de vecinos se este llevando a cabo las interacciones.

Por otra parte vamos a tener como eigenfunciones, funciones que dependen de las coordenadas espaciales: $0, 1, 2, \dots$, y de una función trigonométrica. Entonces escribiendo esto en forma lineal, obtendremos que para el caso en que $k = 1$ vemos una onda cosenosoidal y otra senooidal; cuando $k = 2$, obtendremos una onda con dos oscilaciones, pero siempre se conserva su amplitud y por lo tanto hay que identificar el punto (1) con el (2) de tal forma que el desplazamiento sinusoidal sea respecto a las frecuencias de los anillos. El hecho de que la frecuencia espacial se considere fija, quiere decir que es cosenosoidal con un multiplicador, entonces vemos ondas con frecuencia creciente hasta llegar al extremo de que la frecuencia es tan grande que las partículas siguientes tienen desplazamientos $1, -1, 1, -1, \dots$, etc., lo cual da lugar a una función sinusoidal discreta, ya que lo que vamos a evaluar son puntos discretos.

Entonces tenemos una ley de dispersión que nos relaciona el número de onda (esto es, $(-1)^k a_n / 2$), con la frecuencia (W^k), por lo tanto si producimos una perturbación en el anillo y analizamos la superposición de las ondas en el mismo, particularmente cuando está formado por muchas partículas, observaremos una distorsión ya que todas las ondas no se van a mover con la misma velocidad, debido a que todas tienen el mismo número de onda, pero la frecuencia que les corresponde no es nada lineal ya que siempre se fija el número de onda, en una onda determinada, por estas exponenciales complejas.

Por otra parte una cosa importante que debemos analizar es, la condición mecánica, esto es, $a_0 = -2a_1 - 2a_2$ con lo que veremos de nuevo que el coseno es siempre menor que uno, entonces a_0 es igual a menos todos los coeficientes, (es decir, los elementos de la matriz de movimiento) más los coeficientes multiplicados por un número cuyo valor es menor que uno, por lo tanto siempre saldrán negativos estos eigenvalores, o sea las a 's sumadas, cada vez se verán menores y como a_0 es menos la suma de todas las a 's se cumple que

$$-2 \sum_{i \neq 0} a_i \leq f(W^k) \leq 0$$

Que es el intervalo dentro del cual quedan las frecuencias.

En interacciones a primeros vecinos, la relación de disposición que resulta es un coseno desfasado, tal que sus máximos lleguen a cero, lo cual es responsable de la forma, de la distribución cosenosoidal o arcosenoidal, que siempre tienen las frecuencias de un sistema finito discreto.

En interacciones a segundos vecinos existe una degeneración, en el límite cuando el espectro es continuo y dicha degeneración es cuádruple ya que en este caso la relación de dispersión tiene dos máximos y un mínimo.

Además el hecho que $f(W^k) \leq 0$ es también debido a que a_0 es muy negativo y las a 's no son muy positivas, esto es porque tenemos un sistema oscilatorio y el desplazamiento generalmente resulta de una fuerza aplicada en el sentido contrario, en lugar de una fuerza paralela, por lo tanto los eigenvalores tienen que ser negativos, de tal forma de que sus raíces cuadradas tengan que salir imaginarias, con lo cual se tendrán oscilaciones en lugar de funciones hiperbólicas.

El caso en que la frecuencia temporal es igual al número de onda, no tiene mucho sentido, ya que esto implicaría que habríamos usado unidades tales que la velocidad del sonido tendría el valor de "1", lo cual si se puede hacer, pero no es conveniente, ya que podemos cambiar $f(W^k)$, por cambio en la unidad de su distancia, o en su unidad de tiempo, aunque existen algunos parámetros que no es posible modificar fácilmente, en el caso de que todos resultaran iguales, las ondas se moverían sin distorsión siempre conservarían su forma, además si ondas distintas se mueven con velocidades distintas, entonces habrá distorsión, la cual depende de la que se mueva mas rápidamente. Además sin cambiar la linealidad o propiedades del medio, ciertas ondas se mueven más rápidamente que otras, por lo tanto una onda larga puede llegar antes de que lleguen las componentes de alta frecuencia ya que inicialmente se genera un pulso de un lado y en el transcurso del movimiento éste es modificado, por lo tanto el pulso inicial al llegar al otro extremo cambia, entonces la evidencia que vamos a observar en un anillo, con interacciones a segundos vecinos, es una compresión del rango; una extensión del mismo depende del signo relativo que puedan tener las frecuencias.

Otro aspecto es que se pueden apreciar frecuencias dobles, es decir, frecuencias próximas, entonces fuera de la degeneración normal, existe esta degeneración, la cual hace que una onda pueda pasar en dos direcciones esto mismo sucede en una cadena libre como veremos posteriormente, existe otra degeneración no muy usual, pero que puede suceder en configuraciones muy distintas, como por ejemplo en aquellas en las que el número de onda sea completamente distinto, en donde además pueden resultar las mismas frecuencias, esto tiene que ver con el hecho de que exista cooperación o antagonismo entre primeros y segundos vecinos. Por último es necesario mencionar, que si tenemos interacciones a más vecinos, obtendremos una ley de dispersión más complicada, pero lo interesante es que pueden encontrarse máximos y mínimos entre mayor sea el número de interacciones, lo cual quiere decir que habrá más aproximaciones degeneradas.

Capítulo 6

MODELO CON EXTREMOS FIJOS

6.1 Consideraciones del modelo y gráfica del espectro de eigenfrecuencias.

Este modelo como fue citado anteriormente, se puede considerar como el interior de cualquier cadena, por lo tanto todo lo mencionado anteriormente es válido para este modelo.

En este modelo suponemos que las partículas 1 y N están acopladas a las partículas 0 y $N + 1$ respectivamente, que son consideradas como partículas ficticias con la propiedad de que su desplazamiento es nulo aún cuando tengan el mismo tipo de interacción que las partículas, por lo tanto, podemos decir que estas partículas actúan como paredes que fijan toda la cadena.

Por otra parte la matriz de movimiento para este modelo, está dada por la matriz de coeficientes M , esto es:

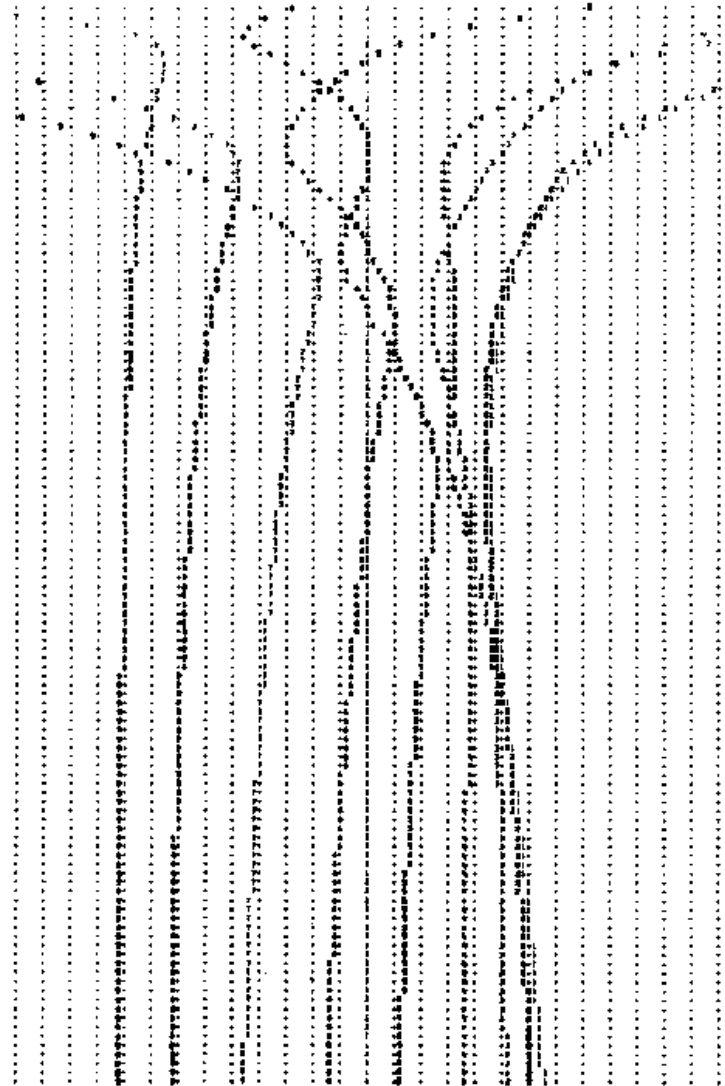
$$M = \begin{bmatrix} a_0 & a_1 & a_2 & & & \\ a_1 & a_0 & a_1 & a_2 & & \\ a_2 & a_1 & a_0 & a_1 & a_2 & \\ & a_2 & a_1 & a_0 & a_1 & a_2 \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & & & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \end{bmatrix}$$

Empleando esta matriz de movimiento, se obtuvo una gráfica de la variación de las frecuencias en función del parámetro $a_1/4a_2$, esto es gráfica (VI.I).

Para claridad en la interpretación de la gráfica, fue necesario diagonalizar numéricamente¹ por el método de Jacobi una matriz de movimiento de 9×9 , que es equivalente, a una cadena con 9 partículas denotadas por $1, 2, \dots, 9$, cuya variación corresponde de la frecuencia mayor a la menor, por lo tanto la variación independiente de cada frecuencia no está involucrada únicamente en alguna de las trayectorias denotadas de $1, \dots, 9$.

¹Esta gráfica se realizó empleando el lenguaje de programación REC implementado (ver. Ref.[14]), en el sistema de computación CDC-3150 del (C.N.A.C.).

GRAFICA VI-I
Gráfica de las frecuencias de una matriz con interacciones
a segundos vecinos con los extremos fijos.



Un resultado importante que se deduce de esta gráfica, es que existe únicamente degeneración doble por cruzamiento en este tipo de interacción a segundos vecinos, como se puede comprobar de la gráfica (VI.I), además se comprueba analítica y gráficamente que esta degeneración doble es por intersección de dos trayectorias, por factorizar los polinomios de Tchebychev ya que en este caso se obtiene la ecuación explícita para cada curva y se demuestra que existe intersección entre ellas.

6.2 Degeneración por cruzamiento.

Vamos a ver un ejemplo de que la degeneración que ocurre en la gráfica del espectro de eigenvalores (gráfica VI.I) es por cruzamiento de dos trayectorias; para ello calculemos el polinomio característico (4.53) por ejemplo para $m = 1$, usando además la forma explícita de los polinomios de Tchebychev, dados por las ecuaciones (D-7).

Por lo tanto si $m = 1$

$$\begin{aligned} x_1(z_1, z_2) &= -\frac{1}{4} \sum_{k=0}^2 (3-k) \{U_k(Z_1)U_k(Z_2)\} &= 0 \\ &= -\frac{1}{4} \{3U_0(Z_1)U_0(Z_2) + 2U_1(Z_1)U_1(Z_2) + U_2(Z_1)U_2(Z_2)\} &= 0 \end{aligned}$$

Usando las ecuaciones (D-7) y haciendo $Z_1 = X$ y $Z_2 = Y$ resulta

$$(4X^2 - 1)(4Y^2 - 1) + 2(2X)(2Y) + 3 = 0$$

factorizando y agrupando términos resulta finalmente que.

$$4X^2Y^2 + 1 = (X - Y)^2$$

Ahora solucionando la ecuación para Y tenemos

$$Y^2(4X^2 - 1) + Y(2X) + (1 - X^2) = 0 \quad (6.1)$$

$$Y = \frac{-X \pm (2X^2 - 1)}{(2X + 1)(2X - 1)} \quad (6.2)$$

Por lo tanto en forma factorizada tenemos que (6.1) toma la forma:

$$(4X^2 - 1) \left(Y + \frac{X - (2X^2 - 1)}{(2X + 1)(2X - 1)} \right) \left(Y + \frac{X + (2X^2 - 1)}{(2X + 1)(2X - 1)} \right) = 0$$

o lo que es lo mismo

$$[(2X + 1)Y + (X + 1)][(2X - 1)Y - (X - 1)] = 0$$

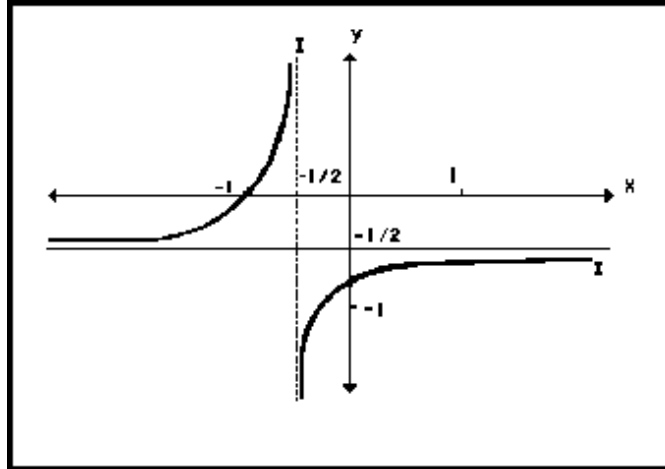
Por lo tanto tenemos dos factores que debemos analizar, esto es

I.

$$Y = -\frac{X + 1}{2X + 1} \quad (6.3)$$

Que tiene las siguientes características: asíntota horizontal en $Y = -\frac{1}{2}$ existe un polo en $X = -\frac{1}{2}$ y un 0 en $X = -1$.

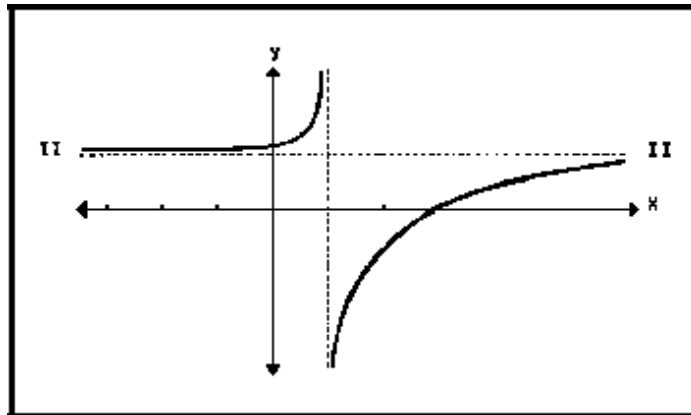
Por lo tanto graficando esta parte únicamente tenemos



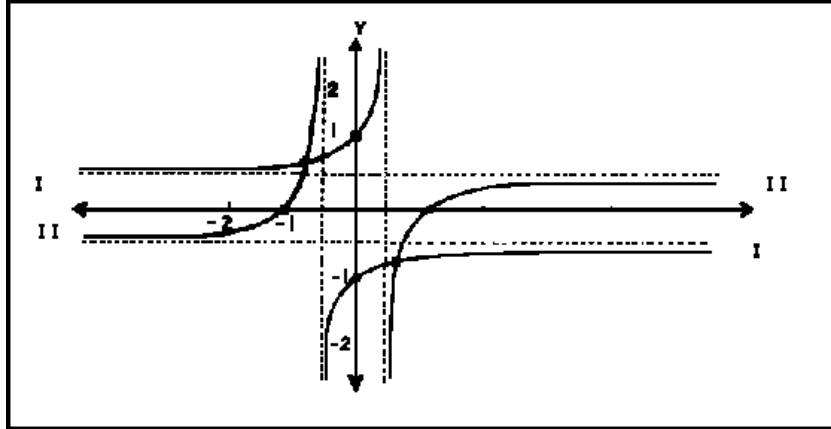
II

$$Y = \frac{X - 1}{2X - 1} \quad (6.4)$$

Que se tiene una asíntota horizontal en $Y = \frac{1}{2}$; un polo en $X = \frac{1}{2}$ y un cero $X = 1$



y superponiendo las dos gráficas, ya que pertenecen a la misma ecuación, resulta



Por lo tanto vemos que existe una verdadera intersección de los dos lugares geométricos; estos puntos de intersección se pueden localizar de la siguiente manera: De (6.3) y (6.4)

$$\frac{X-1}{2X-1} = -\frac{X+1}{2X+1} \rightarrow (X-1)(2X+1) = -(2X-1)(X+1)$$

efectuando los productos y simplificando resulta que

$$X = \pm \frac{1}{\sqrt{2}} = \pm .707$$

y sustituyendo el valor de X en cada una de las ecuaciones (6.3) y (6.4) se encuentra que la intersección ocurre en los puntos $(.70, -.75)$ y $(-.70, -.75)$.

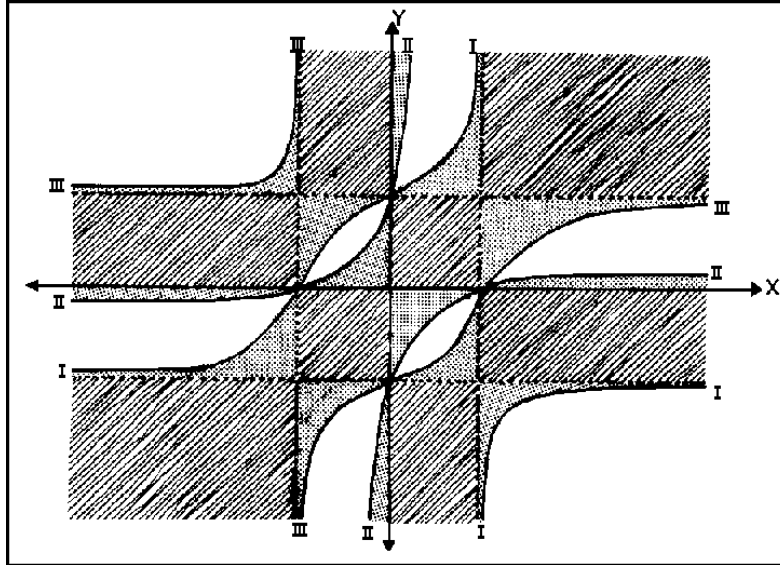
Por un procedimiento similar tenemos para $m = 2$ el polinomio característico resulta ser

$$64X^3Y^3 - 32(X^3Y + XY^3) + 28XY + 32X^2Y^2 - 8(X^2 + Y^2) + 6 = 0$$

y después de cierta álgebra, resulta el polinomio factorizado en la forma siguiente

$$(4XY + 1)(8Y^2 - 4) \left(X + \frac{Y + \sqrt{32Y^4 - 39Y^2 + 12}}{8Y^2 - 4} \right) \left(X - \frac{Y + \sqrt{32Y^4 - 39Y^2 + 12}}{8Y^2 - 4} \right) = 0$$

graficando estos factores independientemente y superponiendo las gráficas resulta finalmente que:



En esta gráfica se muestra claramente la intersección de las diferentes trayectorias; en esta gráfica tenemos asíntotas verticales en: $X = -\frac{1}{\sqrt{2}}$, $X = \frac{1}{\sqrt{2}}$ y $X = 0$ y una asíntota horizontal en $Y = 0$.

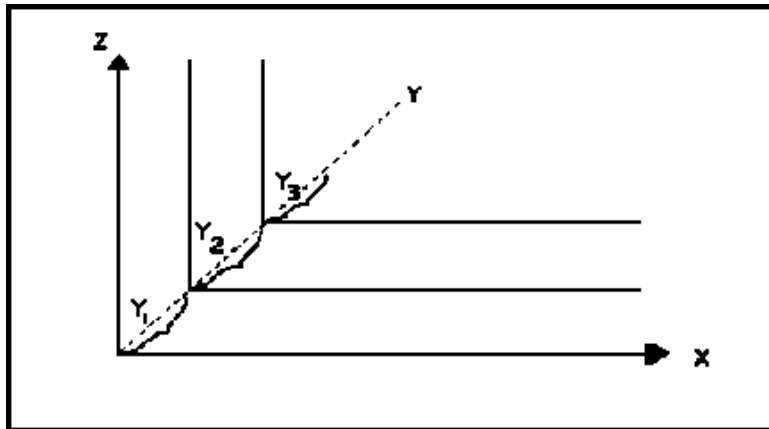
Por un análisis similar, se puede demostrar para $m = 3$, y 4, ya que para argumentos más grandes el álgebra se complica bastante.

6.3 Técnica empleada para graficar los modos normales de vibración (eigenvectores).

En este punto únicamente trataremos de describir los conceptos básicos para graficar los modos normales de vibración de cualquier modelo, ya que el programa principal y las subrutinas que efectúan tales cálculos son descritos posteriormente (apéndice G) con todo detalle.

La idea es graficar los modos normales por medio de la colocación de estrellas en los puntos que representan ciertas coordenadas y puntos que representan las posiciones de equilibrio; en el programa modificado estos puntos lo mismo que las estrellas están unidos, lo cual da lugar a líneas continuas (gráfica VI.III) y líneas quebradas respectivamente, la información que se desea analizar es inicialmente almacenada en archivos, registros y palabras; de tal forma que el número de partículas está dado por la coordenada horizontal (que no es otra cosa que el número de columna), y el desplazamiento es la coordenada vertical; cuando se emplea el sistema de Computación IBM-1130 del C.E.N.A.C., es necesario una vez que se tienen las estrellas unirlos manualmente, con objeto de tener una idea del comportamiento de la cadena que estamos analizando, (esto es debido a las restricciones del sistema de computación), la gráfica así obtenida no representa el movimiento de la cadena, sino su comportamiento en el momento de su desplazamiento máximo; cuando se emplea la máquina IBM-1130 del I.M.P. la

unión de las coordenadas se lleva a cabo automáticamente por medio del graficador del mismo sistema; con esto obtenemos la forma inicial del comportamiento de la cadena, después hay una función de tiempo para amplitud que varía senoidalmente, esto es, con variación de un parámetro seleccionado, además para ver como cambia el modo normal, se emplea un artificio que consiste en que el siguiente vector a graficar se le desplazan sus coordenadas respectivas, con lo cual se observará otra gráfica y así sucesivamente hasta poder observar una gráfica con ciertas perspectivas. La idea matemática es la siguiente; un punto en esta representación tiene coordenadas (X, Y, Z) , entonces se grafica una función $f(X, Y, Z)$, en dos dimensiones. La base de esta gráfica consiste en conservar Z como la coordenada vertical, X como la horizontal y Y es precisamente lo que deseamos desplazar, por ejemplo para $Y = 1$ existirá un desplazamiento en la forma que estamos acostumbrados a graficar, es decir, una serie de líneas coordenadas pero desplazadas en la dirección 45° de acuerdo con su profundidad, como se puede apreciar en la gráfica siguiente: Por lo tanto el punto (X, Y, Z) bajo el parámetro Y



se transforma de la forma siguiente:

$$(X, Y, Z) \rightarrow (X + \alpha Y, Z + \beta Y)$$

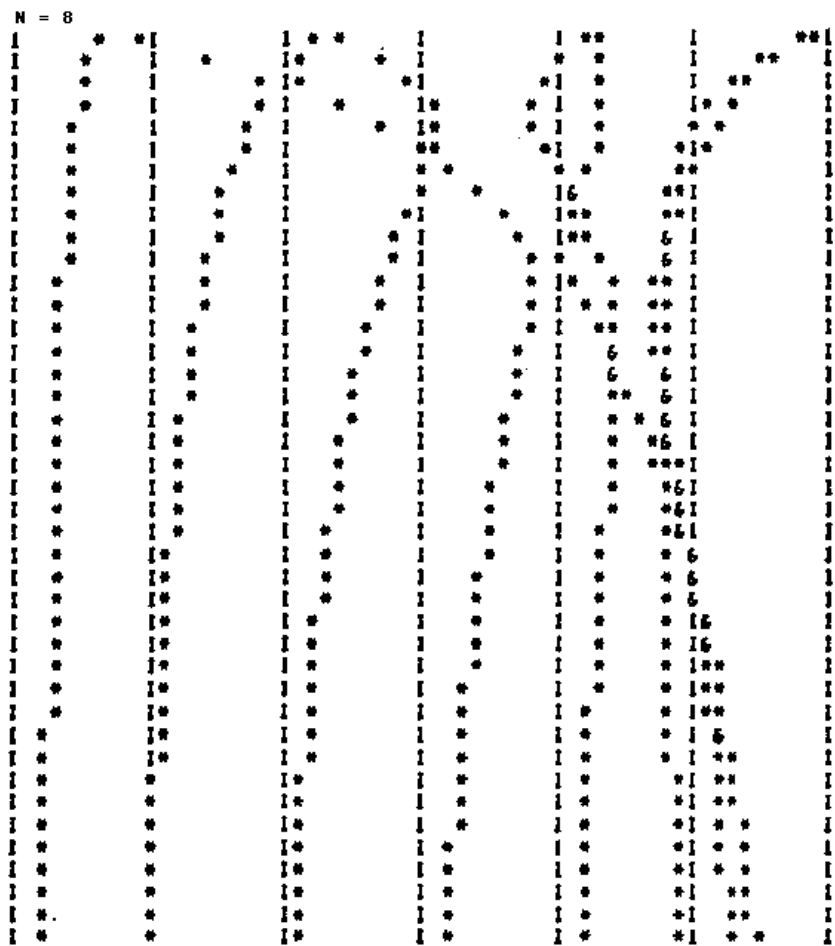
O sea le sumamos a X un incremento horizontal que corresponde al valor Y , y le sumamos a Z un incremento que corresponde a la profundidad.

Otra cosa que podemos notar es que por la selección de α y β se puede cambiar el ángulo de perspectiva, por ejemplo si $\alpha = \beta = 1$ se obtiene la llamada perspectiva isométrica, en cuyo caso la línea Y va a 45° de esto podemos concluir que es posible emplear una escala arbitraria y por lo tanto la compresión o la profundidad van involucradas en la selección de α y β ; si desplazamos 1 a 1 resulta una línea de 60° que es una perspectiva buena.

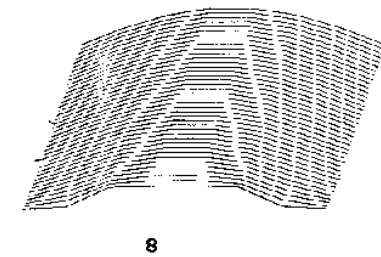
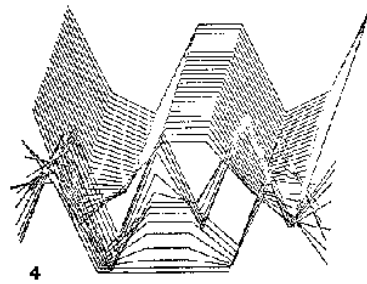
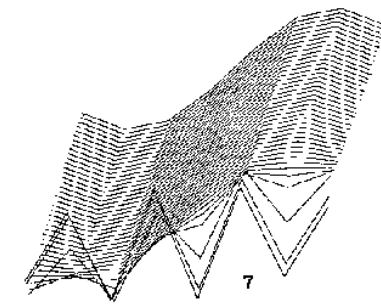
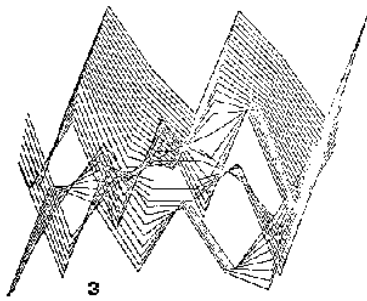
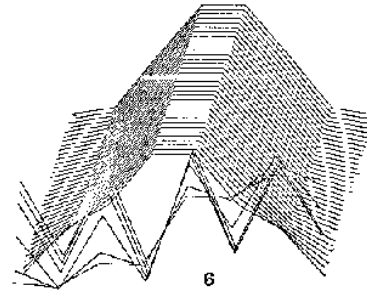
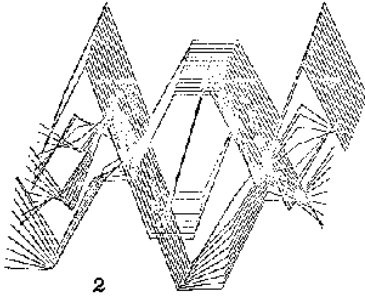
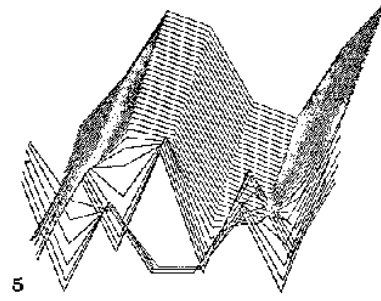
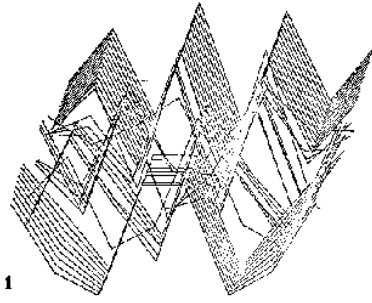
Con estas ideas se obtuvieron modos normales de vibración para este modelo y en general, para todos los modelos analizados en este trabajo, pero debido a que para modelos de 10 partículas se obtienen 10 modos normales de vibración, no es posible incluir todos, por lo cual se incluyen aquellos que dan mayor información.

6.4 Gráficas de los modos normales de vibración.

Para la descripción de los modos normales es conveniente tener un diagrama de frecuencias (Gráfica VI.II) que nos permita observar el comportamiento de estos modos, por lo tanto cada frecuencia corresponderá a un modo. Con objeto de obtener una mayor claridad en la interpretación de estas gráficas tomamos un modelo de 8 partículas pudiéndose extender hasta un cierto límite. La variación del espectro de frecuencias que empleamos, fue en el eje vertical las frecuencias y en el eje horizontal la razón de constantes elásticas entre primeros y segundos vecinos (y), en este diagrama podemos observar la doble degeneración característica de segundos vecinos que es reflejada en los modos normales por medio de discontinuidades. Las gráficas de los modos normales (Gráfica VI.III) como se mencionó anteriormente fueron realizadas en tres dimensiones: en el eje z tomamos como variable independiente la razón de constantes elásticas (y), en el eje x el número de partículas y en el eje $-y$ los desplazamientos (de acuerdo con una perspectiva de 60°). De la serie de modos que describen el comportamiento de la cadena podemos apreciar que el octavo modo normal correspondiente a la frecuencia más baja no tiene nodos y que el primer modo normal tiene el máximo número de discontinuidades, o sea, que el ordenamiento de las frecuencias no se puede llevar a cabo por una regla usual y sencilla como en el caso de interacciones a primeros vecinos, sino que una forma y quizá la más directa en este momento es por observación de los diagramas, y otra característica de los modos es que en la parte de abajo prevalece la interacción a segundos vecinos y en la de arriba la de primeros. Esto se dedujo por comparaciones de los diferentes diagramas.



ESPECTRO DE FRECUENCIAS DE UNA CADENA CON LOS EXTREMOS FIJOS
 GRAFICA VI-II



Capítulo 7

MODELO DE UNA CADENA CON LOS EXTREMOS LIBRES

7.1 Consideraciones del modelo, ecuaciones de movimiento.

Anteriormente vimos que es necesario aumentar elementos en las esquinas de la matriz de movimiento, de tal forma de poder emplearla uniformemente para el modelo con extremos fijos, lo cual es equivalente a prolongar la cadena suponiendo para ello, que existen dos partículas ficticias y que van a permanecer sin movimiento, aún cuando tengan el mismo tipo de interacción con las demás partículas que se encuentran en el interior de la cadena. Esto es semejante al caso de cuando se sostiene un hilo por sus extremos y no se deja mover, lo cual es conveniente por la uniformidad de la cadena, pero es poco real, ya que en las aplicaciones de sólidos es más conveniente suponer “extremos libres”, de tal manera que los resortes extremos no existan, esto es:

$$k_0 = k_n = 0$$

lo cual implicará un cambio en las constantes de las esquinas de la matriz M , esto es:

$$\begin{bmatrix} a'_0 & a_1 & a_2 & & & & & & & & \\ a_1 & a''_0 & a_1 & a_2 & & & & & & & \\ a_2 & a_1 & a_0 & a_1 & a_2 & & & & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & & & & \\ & & & & & & & & & a_2 & \\ & & & & & & & & a''_0 & a_1 & \\ & & & & & & a_2 & a_1 & a_0 & & \end{bmatrix}$$

En donde:

$$\begin{aligned} a'_0 &= -a_1 - a_2 \\ a''_0 &= -2a_1 - a_2 \end{aligned}$$

lo cual tiene validez si empleamos la condición mecánica, esto es $a_0 + 2a_1 + 2a_2 = 0$, analizada con anterioridad.

7.2 Espectro de eigenfrecuencias.

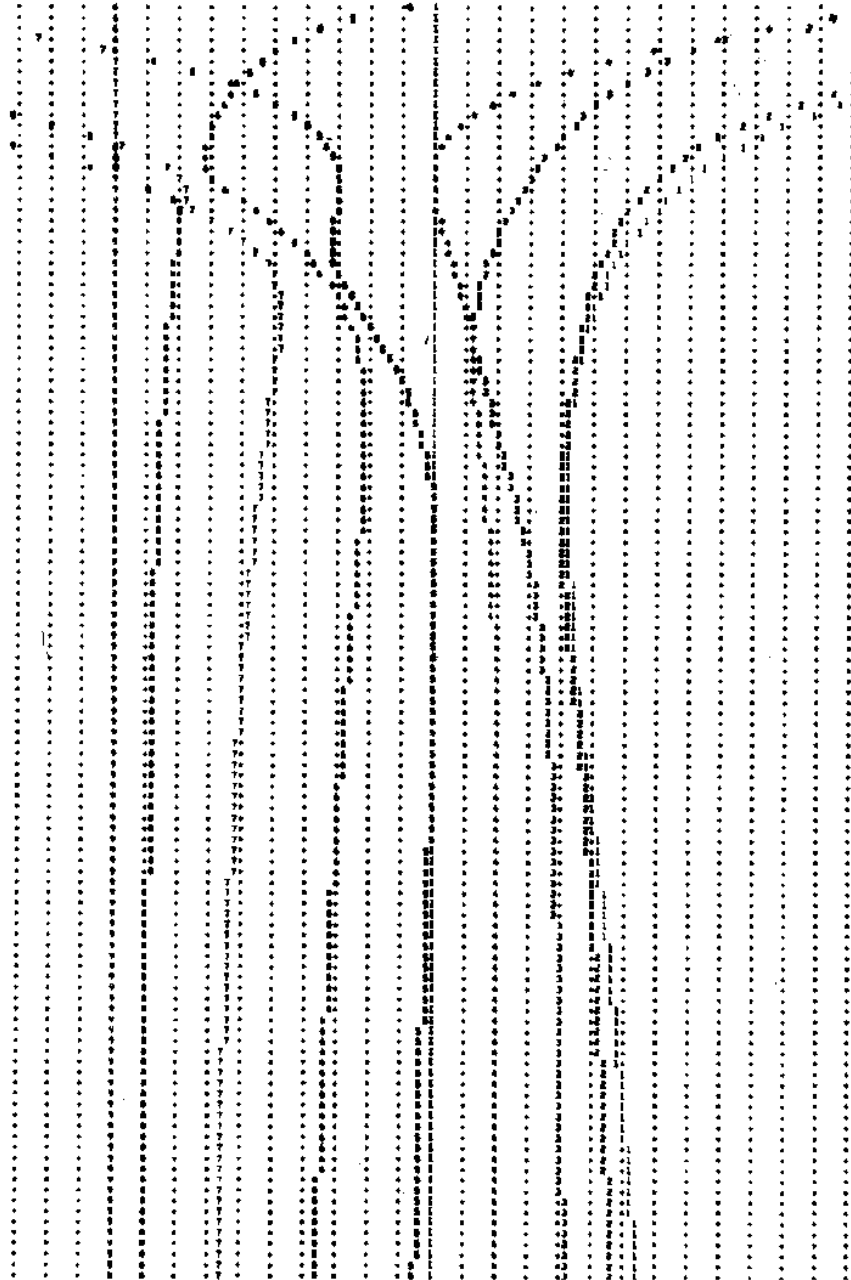
De la misma forma que en el modelo de extremos fijos, se obtuvo una gráfica de la variación de las frecuencias en función del parámetro $a_1/4a_2$, gráfica VII.I.

Entonces es posible pensar en un espectro de condiciones a la frontera en donde las partículas están libres, por lo tanto hay modificaciones en las últimas constantes; debido a que un sólido se mantiene en posición de equilibrio por fuerzas eléctricas entre los átomos, entonces en la superficie del sólido, es decir, en las fronteras del sólido todas las fuerzas que actúan de un lado no tienen su compensación del otro lado, esto es responsable del fenómeno de tensión superficial, podemos pensar que la superficie es más densa, más compacta, que las constantes del resorte son más grandes cerca de los extremos, que en el interior del sólido, por lo tanto vemos que es necesario efectuar una gran serie de modificaciones cerca de los extremos de nuestra cadena, aumentando o disminuyendo las constantes del resorte para poder apreciar todas estas variaciones.

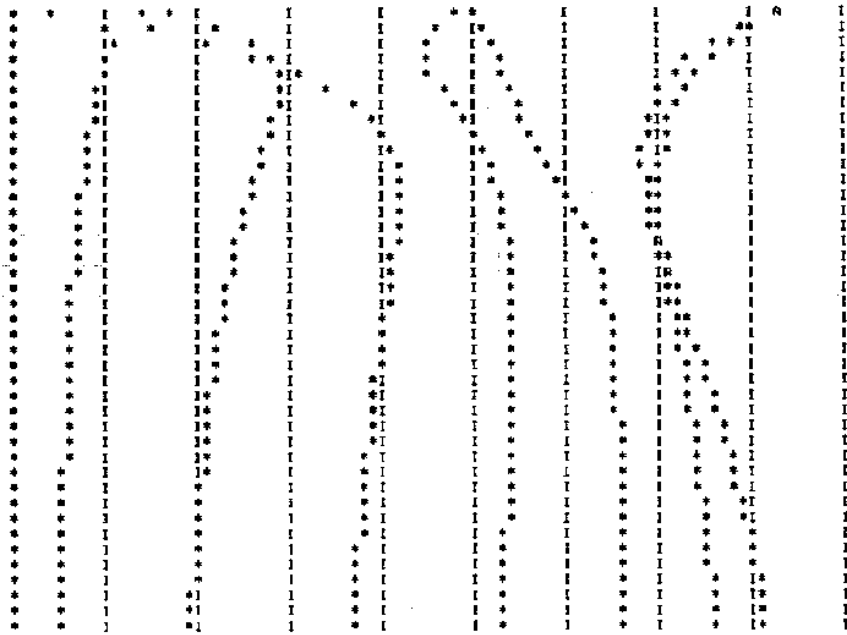
7.3 Modos normales de vibración.

Para la descripción del comportamiento de estos modos normales, empleamos el mismo criterio que en el caso de la cadena de extremos fijos, tanto para la gráfica de frecuencias (Gráfica VII.II), como para la gráfica de los modos normales (Gráfica VII.III), pero se observaron diferentes propiedades, una de ellas es que no existen tantas degeneraciones como en el caso de extremos fijos, además que no se nota mucha discontinuidad cuando se cruzan dos curvas de frecuencia y la observación obvia de que el modo de frecuencia más baja no tiene nodos y en este caso corresponde a una traslación de las partículas, esto es debido al no confinamiento de las partículas extremas, el séptimo modo corresponde a una especie de rotación. En esta gráfica también tomemos como eje $-y$ en el espacio tridimensional, una perspectiva isométrica (correspondiente a un ángulo de 60°), en el eje z a la razón de constantes de interacción y en el eje x el número de partículas.

GRAFICA VII-1
GRAFICA DE LAS FRECUENCIAS DE UNA MATRIZ QUE REPRESENTA INTERACCIONES
A SEGUNDOS VECINOS CON LOS DOS EXTREMOS LIBRES

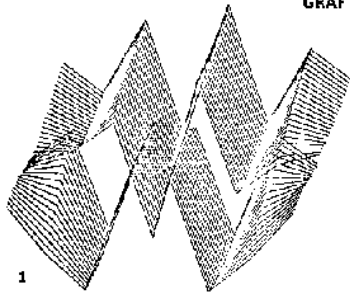


GRAFICA VII-II
 N = 8

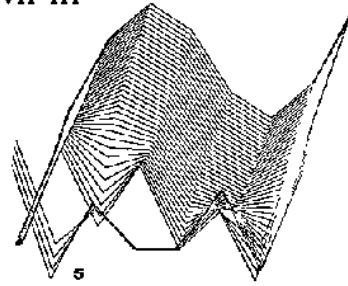


ESPECTRO DE FRECUENCIAS DE UNA CADENA CON LOS EXTREMOS LIBRES

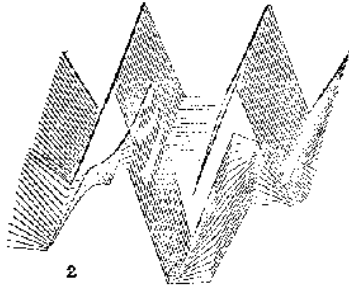
GRAFICA VII-III



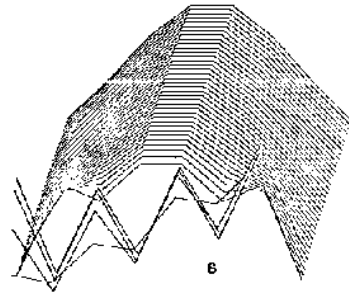
1



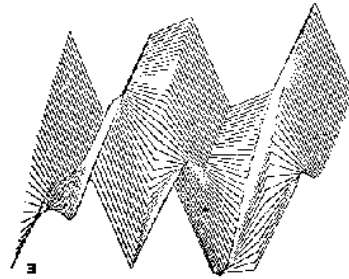
5



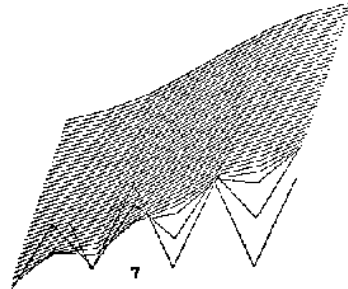
2



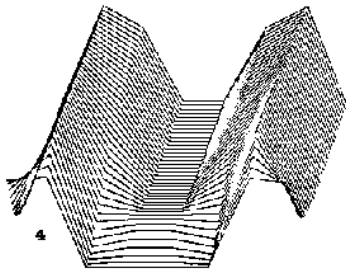
6



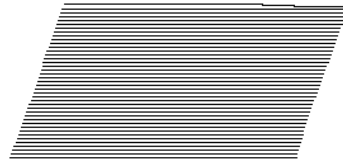
3



7



4



8

Capítulo 8

MODELO DE UNA CADENA DIATÓMICA

8.1 Forma del sistema inhomogéneo.

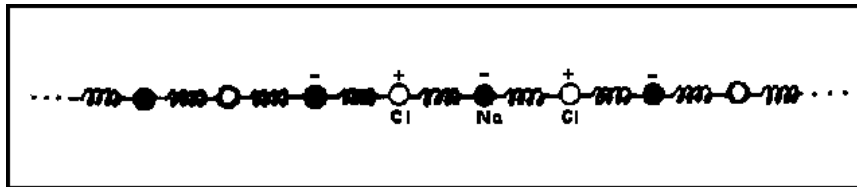
Ahora vamos a analizar el caso que da lugar a un sistema inhomogéneo y al mismo tiempo analizaremos como se modifica nuestro modelo.

Así que vamos a analizar un sistema de la forma:

$$\frac{d^2x}{dt^2} = \begin{bmatrix} a_0 & a_1 & a_2 & \cdot & \cdot & \cdot \\ a_1 & a_0 & a_1 & a_2 & \cdot & \cdot & \cdot \\ a_2 & a_1 & a_0 & a_1 & a_2 & \cdot & \cdot & \cdot \\ \vdots & & & & & & & \end{bmatrix} x + \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \\ \vdots \\ f_n \end{bmatrix} \quad (8.1)$$

Como se puede ver vamos a aplicarle fuerzas a cada partícula, estas fuerzas dependerán únicamente del tiempo, pero como llevan subscritos podemos pensar que también dependen de las coordenadas.

Existe un caso de interés, el cual da lugar a un sistema de ecuaciones diferenciales de la forma anterior, este caso es el de una cadena diatómica, es decir una cadena formada por partículas de dos clases diferentes, generalmente formada de iones, por ejemplo podemos considerar la estructura del $NaCl$ cuya cadena podemos considerarla que está formada de la siguiente manera:



Entonces estos iones en el campo de una onda electromagnética sienten ciertas fuerzas orientadas en la dirección del campo o en contra, de acuerdo con los signos de sus cargas, o sea que si le aplicamos un campo electrostático a la cadena diatómica, los iones positivos se moveran en una dirección y los negativos en la otra dirección, por lo tanto tenemos una fuerza aplicada a cada partícula, dicha fuerza dependerá posiblemente del tiempo, o sea éste es un modelo que nos permite analizar los efectos de un sólido sobre el cual incide una onda electromagnética por ejemplo radiación infrarroja, así que las respuestas a estos campos son vibraciones excitadas que son descritas por un sistema de ecuaciones con un término de fuerza adicional, en la forma indicada por el sistema de ecuaciones diferenciales.

Otro caso que produce vibraciones importantes y que tiene que ver más con la rama acústica, que con la óptica, es el que resulta de aplicar una fuerza sinusoidal únicamente a un extremo de la cadena y lo que deseamos determinar es que tipo de fuerza o como es modificada una fuerza al llegar al otro extremo, por lo tanto queremos ver que tipo de fuerzas son aplicadas y ver si una onda acústica llega al otro extremo o no.

Para solucionar el problema es necesario encontrar nuestra relación de recurrencia, la cual para el interior de la cadena tendrá la forma:

$$\frac{d^2x_i}{dt^2} = a_2x_{i+2} + a_1x_{i-1} + a_0x_i + a_2x_{i-2} + a_1x_{i-1} + f_i(t) \quad (8.2)$$

Como se puede apreciar, la diferencia de esta ecuación con respecto a la cadena normal (ec. 2.4') está dada por la fuerza $f_i(t)$ la cual puede extenderse con el tiempo.

Por lo tanto no es mucha la diferencia con respecto a sistemas ordinarios y de la misma forma como se soluciona un sistema inhomogéneo con ayuda del homogéneo, se tratará de encontrar la solución.

Por lo tanto vamos a suponer que el vector x es un eigenvector, es decir, representa un posible desplazamiento, en el caso de que exista otro tipo de desplazamiento formaremos una combinación de ellos ya que es un problema lineal, o sea podemos combinar los modos normales de vibración representados por los eigenvalores, además vamos a estudiar el movimiento general usando condiciones iniciales arbitrarias en términos de eigenfunciones.

Por lo tanto reescribiendo (8.2) empleando los conceptos anteriores y las condiciones suplementarias, resulta:

$$\begin{aligned} x_{i+2} &= -\frac{a_1}{a_2}x_{i+1} - \frac{\lambda - a_0}{a_2}x_i - \frac{a_1}{a_2}x_{i-1} - \frac{a_2}{a_2}x_{i-2} - \frac{1}{a_2}f_i(t) \\ x_{i+1} &= x_{i+1} \\ x_i &= x_i \\ x_{i-1} &= x_{i-1} \end{aligned} \quad (8.3)$$

Por otra parte los modos normales, que son los eigenvectores (por definición) forman una base, debido a que estamos tratando con matrices simétricas, por lo tanto podemos postular no que $(A - \lambda II)X = 0$, pero si postulamos que para cualquier potencia de k se cumple que $(A - \lambda II)^k X = 0$, lo cual define los eigenvectores; además entre el conjunto de eigenvectores, existe un conjunto completo y en base a esto, es en donde sacamos cualquier vibración, como un modelo normal de vibración, por otra parte en los eigenvectores el tiempo es separable, ya que tenemos un factor que depende del tiempo dado por $e^{i\omega t}$ multiplicados por un factor que depende del espacio, o sea, podemos decir que los eigenvectores forman un tipo de movimiento donde es separable el tiempo, además la base así formada es sumamente deseada, es por tanto,

tan importante diagonalizar la matriz y obtener sus eigenvalores, porque con esta técnica un problema de n dimensiones se reduce a un problema de una dimensión que es mucho más sencilla de solucionar.

En forma matricial el sistema de ecuaciones (8.3) resulta

$$\begin{bmatrix} x_{i+2} \\ x_{i+1} \\ x_i \\ x_{i-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \gamma & \beta & \gamma & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{i+1} \\ x_i \\ x_{i-1} \\ x_{i-2} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -f_i/a_2 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (8.4)$$

Que es la forma matricial de recurrencia que resultó anteriormente, excepto una cantidad que representa la fuerza sobre la partícula i -ésima.

Con objeto de solucionar (8.4) definamos las siguientes cantidades:

$$x_i = \begin{bmatrix} x_{i+1} \\ x_i \\ x_{i-1} \\ x_{i-2} \end{bmatrix} \quad \text{Con lo que resulta} \quad x_{i+1} = \begin{bmatrix} x_{i+2} \\ x_{i+1} \\ x_i \\ x_{i-2} \end{bmatrix}$$

Y también definimos el vector de fuerza como F_i y la matriz de transferencia como T_d .

Con lo cual (8.4) toma la forma

$$x_{i+1} = T_d x_i + F_i$$

Desarrollando para algunas i 's, por ejemplo

$$\begin{aligned} i = 1 & \rightarrow X_2 = T_d X_1 + F_1 \\ i = 2 & \rightarrow X_3 = T_d X_2 + F_2 = T_d(T_d X_1 + F_1) + F_2 = T_d^2 X_1 + T_d F_1 + F_2 \\ i = 3 & \rightarrow X_4 = T_d X_3 + F_3 = T_d^3 X_1 + T_d^2 F_1 + T_d F_2 + F_3 \\ & \vdots \\ i = n & \rightarrow X_n = T_d^n X_1 + T_d^{n-1} F_1 + T_d^{n-2} F_2 + T_d^{n-3} F_3 + \dots \end{aligned}$$

Esta última ecuación la podemos poner finalmente como:

$$X_{n+1} = T_d^n X_1 + \sum_{j=1}^n T_d^{n-j} F_j \quad (8.5)$$

Como vemos la solución obtenida tiene bastante similitud con la solución general que se obtiene en un sistema inhomogéneo (ver. Ref[13]) y que está dada por

$$X(t) = \Omega(t, t_0) X(t_0) + \int_{t_0}^t \Omega(t, \sigma) F(\sigma) d\sigma \quad (8.6)$$

En donde su derivación es exactamente igual, a la efectuada para el caso que estamos tratando, la única diferencia es que aquí queda finita la solución y en el otro caso hemos pasado a un límite, razón por la cual reemplaza a la integral una suma; además debido a que $\Omega(t, t_0)$ es el producto de todas las matrices con tiempo variable, no es muy difícil encontrar las

fuerzas aplicadas a la vibración de una cadena por medio de la técnica que da la solución (8.6), lo único que tenemos que hacer, es expresar la influencia de una fuerza sobre una partícula en el movimiento de otra partícula y esta influencia se expresa por un producto de las n 's correspondientes a la distancia en donde queremos aplicar la fuerza y en donde queramos observar los resultados.

Además posteriormente deduciremos una transformación, que nos permite emplear la ecuación de movimiento M , para poder calcular el espectro de frecuencias y los modos normales de vibración correspondientes.

8.2 Matrices de movimiento y transferencia.

Para poder obtener una relación de dispersión para este modelo partimos del hecho de que la matriz de movimiento toma la forma (ver apéndice F).

$$M_d = \begin{bmatrix} a_0/m & a_1/\sqrt{mM} & a_2/m & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ a_1/\sqrt{mM} & a_0/M & a_1/\sqrt{mM} & a_2/M & 0 & 0 & & \\ a_2/m & a_1/\sqrt{mM} & a_0/m & a_1\sqrt{mM} & a_2/m & 0 & & \\ 0 & a_2/M & a_1/\sqrt{Mm} & a_0/M & a_1/\sqrt{Mm} & a_2/M & & \\ \vdots & & & & & & & \\ 0 & & & & & & & \end{bmatrix}$$

En donde únicamente por consistencia con las demás constantes definidas se tiene que en este caso:

$$a_1 = k, \quad a_2 = k' \quad \text{y} \quad a_0 = -2(k + k')$$

Además la matriz de transferencia para un bloque de 4 p artículos toma la forma después de cierta álgebra como

$$T = \begin{bmatrix} 1\sqrt{M/m}a_1/a_2 & (\lambda M - a_0)/a_2 & -\sqrt{M/m}a_1/a_2 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (8.7)$$

Para los otros bloques, tenemos exactamente la misma cosa, con reemplazar m por M en todos los lugares, esto es:

$$\begin{bmatrix} -\sqrt{m/M}a_1/a_2 & (\lambda m - a_0)/a_2 & -\sqrt{m/M}a_1/a_2 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (8.8)$$

Con objeto de simplificar el álgebra será conveniente mantener la razón de masas constante; $Mm = \mathcal{M}^2$ e introducir el cociente de las masas como un parámetro, esto es:

$$\rho^2 = \frac{m}{M}$$

también es conveniente denotar la razón de constantes de resorte como otro parámetro, esto es:

$$K = \frac{a_1}{a_2}$$

En cuyo caso las dos matrices (8.7) y (8.8) toman la forma:

$$\begin{bmatrix} -K/\rho & (\lambda M - a_0)/a_2 & -K/\rho & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

y

$$\begin{bmatrix} -K\rho & (\lambda m - a_0)/a_2 & -K\rho & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

En este modelo estamos considerando que todas las constantes elásticas permanecen fijas, pero las masas alternan, es decir, vamos a suponer que tenemos una masa pesada y una ligera, por lo tanto multiplicando las matrices de transferencia resulta finalmente la matriz.

$$T_d = \begin{bmatrix} K^2 + (\lambda M - a_0)/a_2 & -\frac{K}{\rho}[(\lambda m - a_0)/a_2] - \frac{K}{\rho} & K^2 - 1 & \frac{K}{\rho} \\ -K\rho & (\lambda m - a_0)/a_2 & -K\rho & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Notemos además que

$$\begin{aligned} m &= \mathcal{M}\rho & ; & & \rho &= \frac{mM}{\mathcal{M}M} = \frac{\mathcal{M}^2}{\mathcal{M}M} = \frac{\mathcal{M}}{M} \\ M &= \frac{\mathcal{M}}{\rho} & y & & \rho^2 &= \frac{m}{M} \end{aligned} \quad (8.9)$$

Además el eigenvalor λ siempre va involucrado en la constante a_2 por lo tanto, de (8.9) resultan las igualdades siguientes

$$\begin{aligned} \lambda M/a_2 &= \lambda \mathcal{M}/a_2 \rho \\ \lambda m/a_2 &= \lambda \mathcal{M}\rho/a_2 \end{aligned} \quad (8.10)$$

Con lo cual definimos $\xi = \lambda \mathcal{M}/a_2 = \lambda \sqrt{Mm}/a_2$ que depende en la media geométrica de las masas y la constante del resorte a segundos vecinos.

Además tomando en cuenta el término a_0/a_2 , tenemos

$$a_0 = -2(a_1 + a_2)$$

así que

$$-a_0/a_2 = 2(K + 1) \quad (8.11)$$

Sustituyendo las ecuaciones (8.10) y (8.11) en la matriz de transferencia T_d resulta finalmente:

$$T_d = \begin{bmatrix} K^2 + \frac{\xi}{\rho} + 2(K + 1) & -\frac{K}{\rho}[\xi\rho + 2(K + 1) + 1] & K^2 - 1 & \frac{K}{\xi} \\ -K\rho & \xi\rho + 2(K + 1) & -K\rho & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

8.3 Relación de Dispersión.

Ahora deseamos encontrar los números de onda, lo cual se puede hacer encontrando los eigenvalores μ de la matriz de transferencia.

$$\begin{bmatrix} K^2 + \frac{\xi}{\rho} + 2(K+1) - \mu & -\frac{K}{\rho}(\xi\rho + 2(K+1) + 1) & K^2 - 1 & \frac{K}{\rho} \\ -K\rho & \xi\rho + 2(K+1) - \mu & -K\rho & -1 \\ 1 & 0 & -\mu & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -\mu \end{bmatrix} = 0$$

desarrollando el determinante, empleando el tercer renglón resulta

$$\begin{aligned} & -\mu K^2(\xi\rho + 2K + 3) - (K^2 - 1) + \mu(K^2 - 1)(\xi\rho + 2K + 2 - \mu) + K^2 \\ & -\mu\{-\mu(K^2 + \frac{\xi}{\rho} + 2(K+1) - \mu)(\xi\rho + 2K + 2 - \mu) - K^2 + \\ & + (K^2 + \frac{\xi}{\rho} + 2(K+1) - \mu) + \mu K^2(\xi\rho + 2K + 3)\} = 0 \end{aligned}$$

Reagrupando términos resulta la relación de dispersión que involucra, M y ξ .

$$\begin{aligned} & \mu^4 - \mu^3[K^2 + \xi(\rho + \frac{1}{\rho}) + 4(K+1)] + \mu^2[(K^2 + \xi/\rho + 2(K+1)) \cdot (\xi\rho + 2(K+1)) + \\ & -K^2 \cdot (\xi\rho + 2(K+1) - 2K^2 + 2) - \mu[K^2 + \xi(\rho + 1/\rho) + 4(K+1)] + 1 = 0 \end{aligned}$$

El coeficiente de μ^2 puede ser simplificado más, para esto, definimos

$$X = 2(K+1)$$

esto es

$$\begin{aligned} (X + \frac{\xi}{\rho})(X + \xi\rho) - 2K^2 + 2 &= X^2 + X(\frac{\xi}{\rho} + \xi\rho) + \xi^2 - 2K^2 + 2 \\ &= 4(K+1)^2 + [2(K+1)\xi(\frac{\rho+1}{\rho}) + \xi^2 - 2K^2 + 2] \end{aligned}$$

Por lo tanto la relación de dispersión, conectando μ y ξ es

$$\begin{aligned} & \mu^4 - \mu^3[K^2 + \xi(\rho + \frac{1}{\rho}) + 4(K+1)] + \mu^2[4(K+1)^2 - 2K^2 + 2 + 2(K+1)\xi(\frac{\rho+1}{\rho}) + \xi^2] \\ & -\mu[K^2 + \xi(\rho + \frac{1}{\rho}) + 4(K+1)] + 1 = 0 \end{aligned} \quad (8.12)$$

Como vemos los coeficientes de esta ecuación resultan simétricos, como en el caso del interior de una cadena. Además sabemos que las raíces ocurren en parejas recíprocas, definamos

$$\begin{aligned} r_1 + \frac{1}{r_1} &= a \\ r_2 + \frac{1}{r_2} &= b \end{aligned} \quad (8.13)$$

Entonces la forma factorizada de la ecuación toma la forma

$$(\mu^2 - a\mu + 1)(\mu^2 - b\mu + 1) = 0$$

desarrollando

$$\mu^4 - (a+b)\mu^3 + (2+ab)\mu^2 - (a+b) + 1 = 0 \quad (8.14)$$

Comparando las ecuaciones (8.12) con (8.14), tenemos que resolver las ecuaciones siguientes:

$$\begin{aligned} a+b &= K^2 + \xi\left(\rho + \frac{1}{\rho}\right) + 4(K+1) \\ 2+ab &= 4(K+1)^2 - 2K^2 + 2 + 2(K+1)\xi\left(\rho + \frac{1}{\rho}\right) + \xi^2 \end{aligned}$$

Como la relación de masas entra solamente en la combinación.

$$P = \rho + \frac{1}{\rho} \quad (8.15)$$

podemos, por lo tanto introducir esta definición en las dos ecuaciones anteriores resultando

$$\begin{aligned} a+b &= K^2 + \xi P + 4(K+1) \\ 2+ab &= 2(K^2 + 4K + 3) + 2(K+1)\xi P + \xi^2 \end{aligned} \quad (8.16)$$

Estas ecuaciones determinan los números de onda como función de K , P y ξ . Sin embargo, podemos resolver la relación de dispersión para ξ , para esto despejamos ξ de la ecuación (8.12) junto con la definición (8.15) resultando

$$\xi^2 + 2P\xi[K+1-C] + 4C^2 - 2C[K^2 + 4(K+1)] + 4(K+1)^2 - 2K^2 = 0 \quad (8.17)$$

En donde se empleó una definición anterior, esto es

$$\mu + \frac{1}{\mu} = 2C$$

La ecuación ha sido simplificada al punto de que puede ser solucionada para ξ , esto es:

$$\xi = \frac{-2P(K+1-C) \pm \sqrt{4P^2(C-K+1)^2 - 4\{4C^2 - 2C[K^2 + 4(K+1)] + 2K^2 + 8K + 4\}}}{2}$$

Que después de cierta álgebra toma la forma simplificada

$$\xi + P[K-C+1] = \pm \sqrt{(P^2-4)(K-C+1)^2 + 2K^2(C+1)} \quad (8.18)$$

Con objeto de checar el álgebra, consideremos el caso donde $M = m$ así que

$$\rho^2 = \frac{m}{M} = 1$$

$$P = \rho + \frac{1}{\rho} = 2$$

Sustituyendo estos valores en la ecuación (8.18) tenemos

$$\xi + 2(K-C+1) = \pm K\sqrt{2(C+1)}$$

Regresando a la relación de dispersión (8.17) esto es

$$\xi^2 + 2P\xi(K + 1 - C) + 4C^2 - 2C(K^2 + 4(K + 1)) + 2(K^2 + 4K + 2) = 0$$

Ahora queremos solucionar para C en términos de ξ, P y K , por lo tanto reduciendo a una ecuación de segundo orden la ecuación anterior.

$$4C^2 + 2C(P\xi + K^2 + 4K + 4) + \xi^2 + 2P\xi(K + 1) + 2(K^2 + 4(K + 2)) = 0$$

Por lo tanto

$$C = \frac{2[P\xi + (K + 2)^2 \pm \sqrt{4[P\xi + (K + 2)^2]^2 - 4 \cdot 4[\xi^2 + 2P\xi(K + 1) + 2(K^2 + 4K + 2)]}}{8} \quad (8.19)$$

El discriminante, que define la transición entre números de onda reales y complejos, es:

$$[P\xi + (K + 2)^2]^2 = 4[\xi^2 + 2P\xi(K + 1) + 2(K^2 + 4K + 2)]$$

que se reduce a la ecuación simplificada

$$(P^2 - 4)\xi^2 + 2K^2P\xi + K^2(K + 4)^2 = 0 \quad (8.20)$$

Para P y K fijos, hay dos valores de ξ que satisfacen esta relación, y para los cuales C puede tener una doble raíz. Cuando $P = 2$, hay solamente una raíz.

Para el caso general

$$\xi = \frac{-2K^2P \pm \sqrt{4K^2P^2 - 4(P^2 - 4)(K^2(K + 4)^2)}}{2(P^2 - 4)} \quad (8.21)$$

Por lo tanto ξ tendrá únicamente una raíz cuando

$$K^2P^2 = (P^2 - 4)(K + 4)^2$$

despejando P^2 resulta

$$P^2 = \frac{(K + 4)^2}{2(K + 2)} \quad \begin{array}{l} \text{si} \quad K = 1 \rightarrow P^2 = 4.16; \\ \text{si} \quad K = 2 \rightarrow P^2 = 4.5 \\ \text{o sea que} \quad P = 2 + \xi \end{array} \quad (8.22)$$

Para valores de P dados por la ecuación anterior, tendremos la frontera entre la región real y compleja de los números de onda, además es conveniente conocer donde $C = \pm 1$, retornando a la relación de dispersión dada por (8.17) y suponiendo $C = 1$.

$$\xi^2 + 2KP\xi + 4 - 2(K^2 + 4(K + 1)) + 2(K^2 + 4K + 2) = 0$$

Que se reduce a:

$$\xi(\xi + 2KP) = 0$$

Por lo tanto para $C = 1$, $\xi = 0$; $\xi = -2KP$. Para $C = -1$

$$\xi^2 + 2P\xi(K + 2) + 4 + 2(K^2 + 4(K + 1)) + 2(K^2 + 4K + 2) = 0$$

que es simplificado en la forma

$$\xi^2 + 2(K + 2)P\xi + 4(K + 2)^2 = 0$$

Esto ocurre cuando

$$\xi = -(K + 2) \left[P \mp \sqrt{P^2 - 4} \right]$$

O sea que si $C = -1$ entonces ξ tendrá dos raíces distintas y generalmente positivas, ya que el radical es siempre positivo.

Modificando ligeramente la relación de dispersión (8.17)

$$\begin{aligned} \xi^2 + 2P\xi(K + 1 - C) + 4C^2 - 2C(K^2 + 4K + 4) + 2(K^2 + 4K + 4) - 4 &= 0 \\ \xi^2 + 2P\xi(K + 1 - C) + 4C^2 - 2(C - 1)(K^2 + 4K + 4) - 4 &= 0 \end{aligned}$$

finalmente

$$\xi^2 + 2P\xi(K + 1 - C) + 4(C^2 - 1) - 2(C - 1)(K + 2)^2 = 0$$

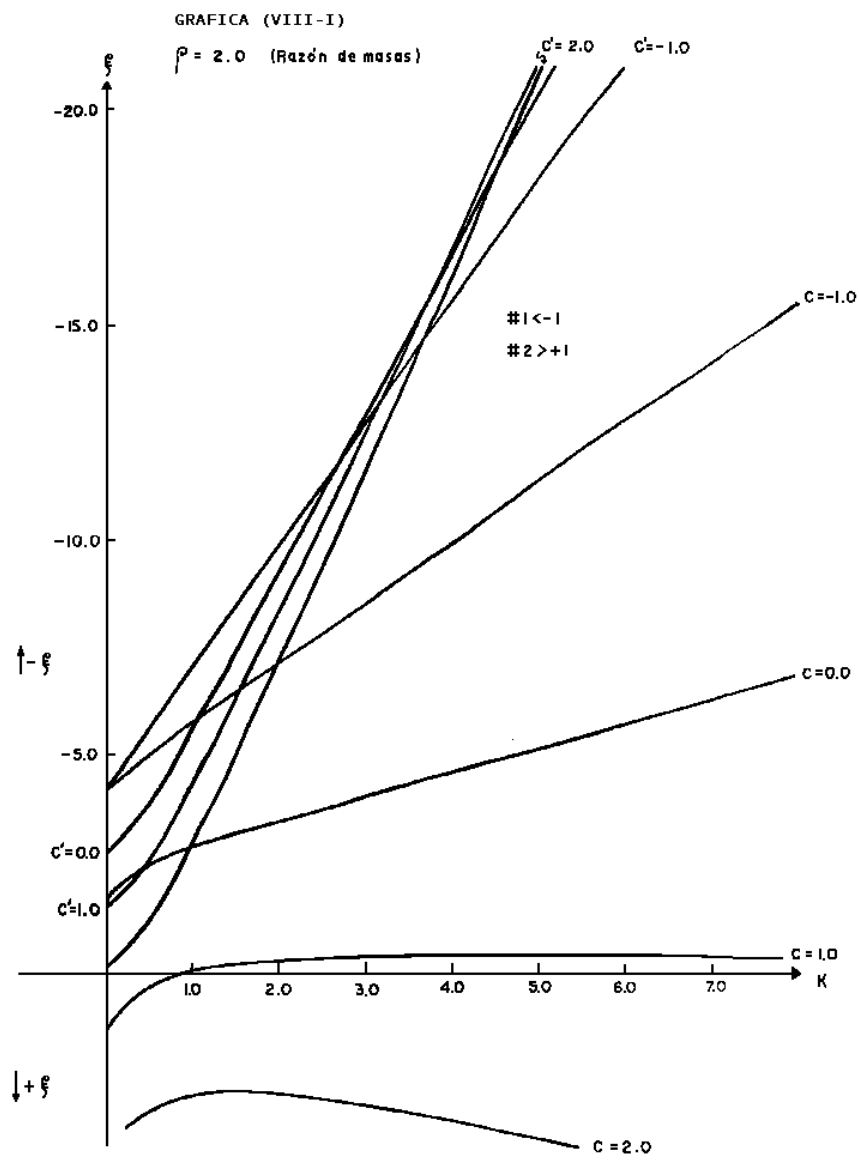
Que es finalmente la ecuación que deseamos graficar e interpretar físicamente, esto es gráficas (VIII.1), (VIII.2), (VIII.3).

Lo que deseamos graficar es $\xi = \xi(K, P, C)$. En donde tenemos que P es un parámetro que es la razón de masas y C es una constante que depende de los dos números de onda y que en las gráficas es la que nos va a definir los contornos, con objeto de distinguir las dos C 's que se obtienen una la denotamos con C y la otra con C' .

En la gráfica (VIII.1) la razón de masas P que utilizamos fué de 2:1, en esta gráfica podemos apreciar las bandas características de las cadenas diatómicas, así podemos distinguir la banda acústica (esta banda se caracteriza por curvas de baja frecuencia) entre los contornos de $C = 1.0$ y $C = -1.0$ en esta región también podemos apreciar que al menos existe una onda oscilatoria la cual nos indica que hay propagación. La banda óptica está dada por la familia de curvas de $C < 1$, en esta gráfica vemos que no es posible ordenar las frecuencias por el número de onda que es característico de primeros vecinos, esto es debido a que hay una cierta inversión de las frecuencias en esta región. La banda prohibida formada entre estas dos regiones se caracteriza porque no existe ninguna onda $|C| < 1$.

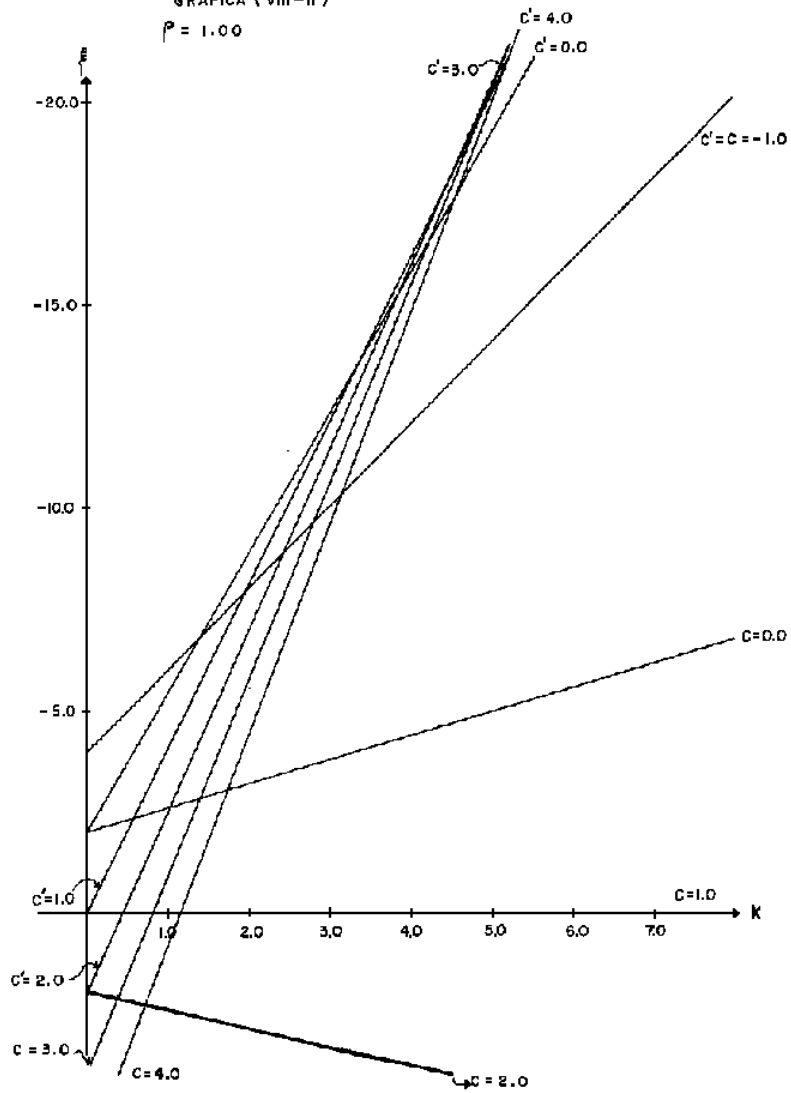
La gráfica (VIII.2) se llevó a cabo con una razón de masas de 1 : 1 lo cual nos indica que es el caso de la cadena uniforme, al comparar esta gráfica con la (IV.IV) vemos que concuerdan en algunos aspectos, otros aspectos que no son observados con claridad debido a que se necesita una investigación mayor en este punto, como por ejemplo no llevamos a cabo el análisis completo de la región compleja que se caracteriza por estar formada por familias de hipérbolas, sin embargo, el único fin que nos propusimos fue el de indentificar ciertos aspectos que al final de cuentas, fueran congruentes. La gráfica (VIII.3) es con razón de más 5 : 1 ésta da esencialmente la misma información que la gráfica (VIII.2).

Una cosa que podemos apreciar de estas gráficas es que al aumentar la razón de masas, los rangos de las bandas se van haciendo más cortos.



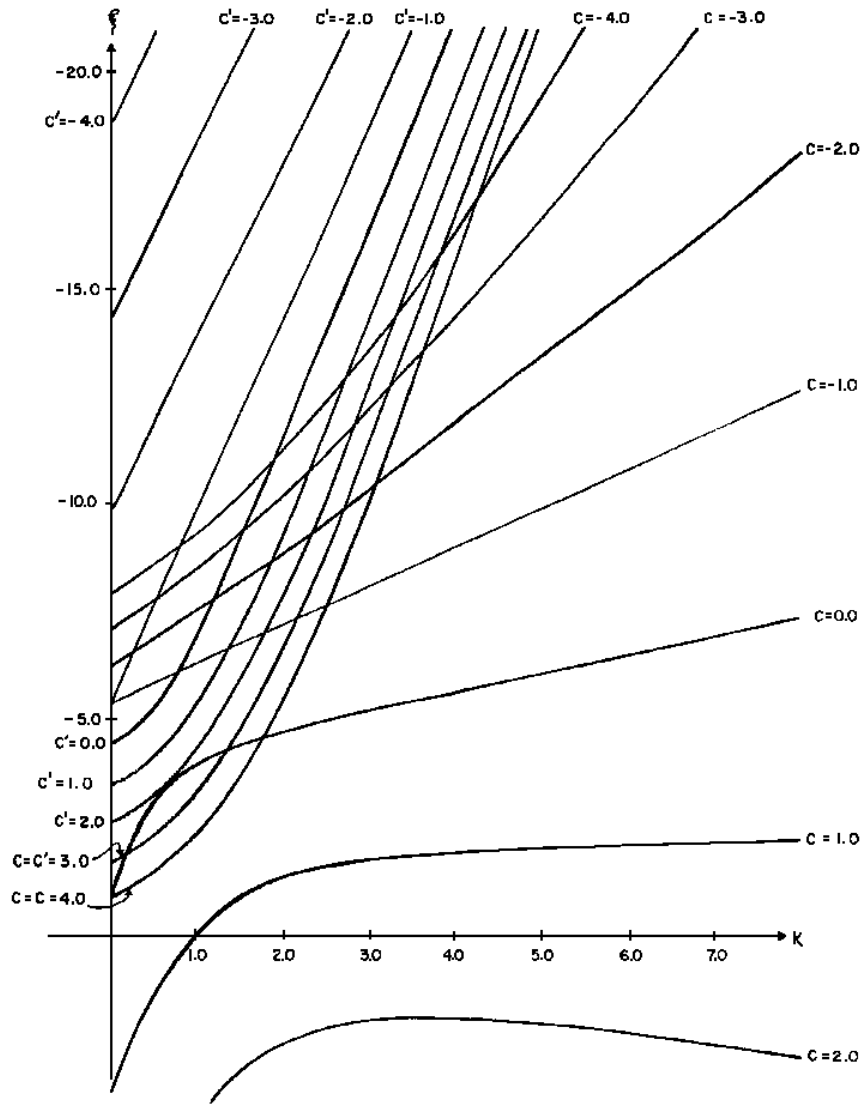
GRAFICA (VIII-II)

$\rho = 1.00$



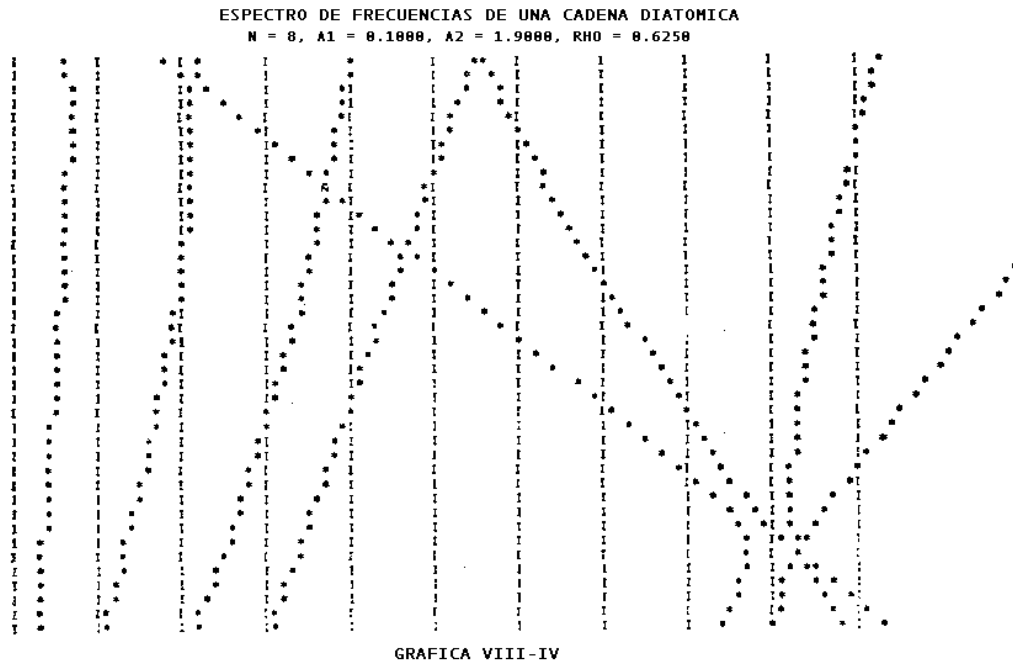
GRAFICA (VIII-III)

$\rho = 5.0$



8.4 Modos Normales de vibración.

El espectro de frecuencias (Gráfica VIII.4) que nos marcará tendencias del comportamiento de los modos normales se realizó tomando como variable independiente la variación de frecuencias y como variable dependiente se tomó a a_1 como constante y a_2 de tal forma que $a_1 + a_2$ fuera constante, en esta misma forma se tomó el eje z de los modos normales de vibración (gráfica VIII.5), el eje $-y$ como los desplazamientos, y el eje x como el número de partículas; además se tomó un cociente de masas de 0.6250. En este caso se pueden apreciar regiones no definidas completamente como en el caso límite de primeros vecinos (banda acústica y óptica), estas regiones pueden traslaparse esto pasa cuando las interacciones a segundos son severas; además, si el número de onda es complejo puede dar lugar a un modo localizado que lo es en el sentido de que puede atravesar la región prohibida, si al menos uno es real indicará propagación. Un resultado interesante que se puede apreciar en el espectro de frecuencias es que en la rama óptica las curvas de frecuencia son rectas y que convergen en un punto (a este punto no se le ha podido dar una interpretación adecuada) de la misma forma que en los modos normales de vibración de modelos anteriores, podemos notar, que el modo de más baja frecuencia no tiene puntos nodales, de esto podemos decir que este modo es susceptible a todo tipo de variación.



Otra forma por la cual se puede ver las curvas definidas por la relación de dispersión es la siguiente.

Otra vez la relación de dispersión

$$\xi^2 + 2P\xi(K + 1) - 2P\xi C + 4C^2 - 2C(K^2 + 4(K + 1)) + 2(K^2 + 4K + 2) = 0$$

Que podemos poner en la siguiente forma

$$[\xi \ C] \begin{bmatrix} 1 & -P \\ -P & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \xi \\ C \end{bmatrix} + 2P\xi(K+1) - 2C(K^2 + 4(K+1)) + 2(K^2 + 4K + 2) = 0$$

Calculando las raíces de la matriz de 2×2

$$\begin{vmatrix} 1 - \lambda & -P \\ -P & 4 - \lambda \end{vmatrix} = 0 \\ (1 - \lambda)(4 - \lambda) - P^2 = 0$$

Por lo tanto las raíces están dadas por

$$\lambda = \frac{5 \pm \sqrt{25 + 4(P^2 - 4)}}{2}$$

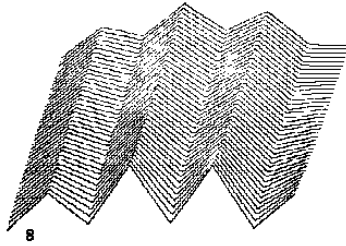
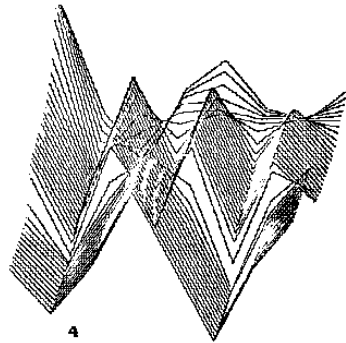
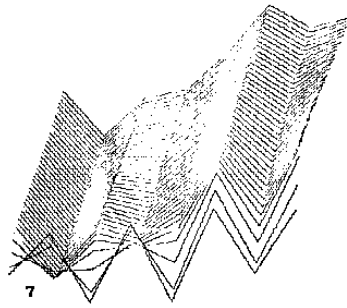
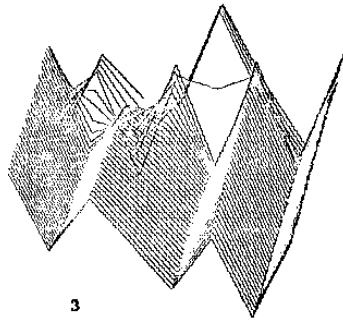
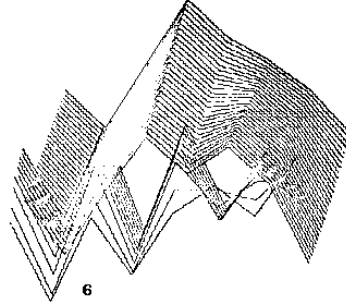
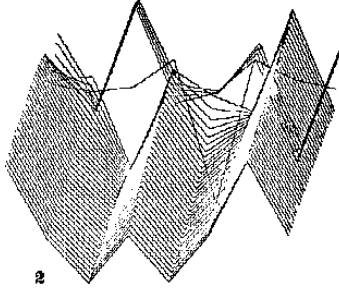
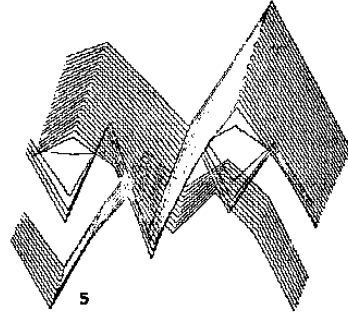
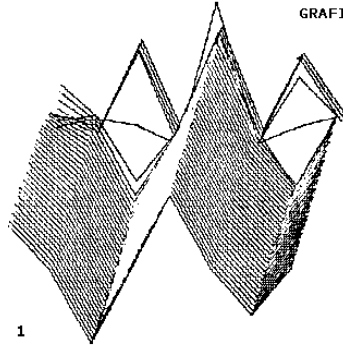
Con lo cual vemos que siempre tenemos una raíz positiva y una negativa.
Calculando las componentes de los eigenvectores tenemos

$$\begin{bmatrix} 1 & -P \\ -P & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ U \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} 1 \\ U \end{bmatrix}$$

$$1 - PU = \lambda \\ U = \frac{1 - \lambda}{P}$$

Por lo tanto la relación de dispersión define familia de hipérbolas.

GRAFICA VIII-V



Capítulo 9

MODELO DE UNA CADENA CON UN DEFECTO PUNTUAL EN UNA PARTÍCULA

9.1 Modificación de un elemento de la matriz de movimiento.

Lo que se trata de cambiar en este modelo, son las condiciones para la última partícula, la cual equivale a cambiar el elemento de la esquina superior izquierda de la matriz M . Esto es, queremos cambiar el elemento a_0 físicamente sería necesario cambiar algunos elementos más, pero vamos a analizar que pasa con el cambio de este elemento únicamente.

Anteriormente vimos que para el caso de una cadena sin modificación la relación de recurrencia tenía la forma

$$X_{n+2} = T_d^n X_2$$

Ya que en este caso considerábamos que todas las masas de nuestro modelo eran iguales, pero ahora con las modificaciones del resorte en su extremo resulta:

$$X_{n+2} = (T_d' T_d^{-1})(T_d^n) X_2 \tag{9.1}$$

Ya que vamos a reemplazar la última partícula, lo cual equivale a cambiar a_0 por a_0' y por lo consiguiente T por T' , por lo tanto $T' T^{-1}$ es un producto matricial de la forma

$$T_d' T_d^{-1} \begin{bmatrix} \gamma & \beta & \gamma & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & \gamma & \beta & \gamma \end{bmatrix}$$

En donde, como vimos anteriormente (ecs. 2.13), $\beta = \frac{\lambda - a_0}{a_2}$ y por lo tanto $\beta' = \frac{\lambda - a'_0}{a_2}$, por lo cual

$$\beta' - \beta = \frac{a_0 - a'_0}{a_2} = \epsilon \quad (9.2)$$

por lo tanto el producto se reduce finalmente a que

$$T'_d T_d^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \epsilon & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Como lo que nos interesa calcular es $(T'_d T_d^{-1}) T_d^n$ y como no conocemos la forma explícita de M^n podemos suponer que es de la forma

$$T_d^{(n)} = \begin{bmatrix} t_{11} & t_{12} & t_{13} & t_{14} \\ t_{21} & t_{22} & t_{23} & t_{24} \\ t_{31} & t_{32} & t_{33} & t_{34} \\ t_{41} & t_{42} & t_{43} & t_{44} \end{bmatrix}$$

Por lo tanto el producto matricial $(T'_d T_d^{-1}) T_d^n$ queda finalmente

$$(T'_d T_d^{-1}) T_d^n = \begin{bmatrix} t_{11} + \epsilon t_{31} & t_{12} + \epsilon t_{32} & t_{13} + \epsilon t_{33} & t_{14} + \epsilon t_{34} \\ t_{21} & t_{22} & t_{23} & t_{24} \\ t_{31} & t_{32} & t_{33} & t_{34} \\ t_{41} & t_{42} & t_{43} & t_{44} \end{bmatrix}$$

Entonces aplicando la condición que determina los eigenvalores (ec. 2.18) resulta

$$T_{d11}^{(n)} = \begin{vmatrix} t_{11} + \epsilon t_{31} & t_{12} + \epsilon t_{32} \\ t_{21} & t_{22} \end{vmatrix} = 0$$

Que se puede factorizar en la forma siguiente:

$$\begin{vmatrix} t_{11} & t_{12} \\ t_{21} & t_{22} \end{vmatrix} - \epsilon \begin{vmatrix} t_{21} & t_{22} \\ t_{31} & t_{32} \end{vmatrix} = 0 \quad (9.3)$$

Esta última ecuación polinomial es la que tenemos que interpretar y solucionar, pero antes de hacerlo analicemos algunas cosas.

Como se puede apreciar en (9.3) el primer determinante es la condición para encontrar los eigenvalores del problema sin perturbar y el segundo determinante nos da la forma de la perturbación, ya que sus elementos fueron determinados por los elementos del producto matricial $T' T^{-1}$, además hemos visto que recursivamente cada determinante corresponde a una submatriz de $(T' T^{-1}) T^n$.

$$P_1(\lambda) = \begin{vmatrix} t_{11} & t_{12} \\ t_{21} & t_{22} \end{vmatrix} \quad \text{y} \quad P_2(\lambda) = \begin{vmatrix} t_{21} & t_{22} \\ t_{31} & t_{32} \end{vmatrix}$$

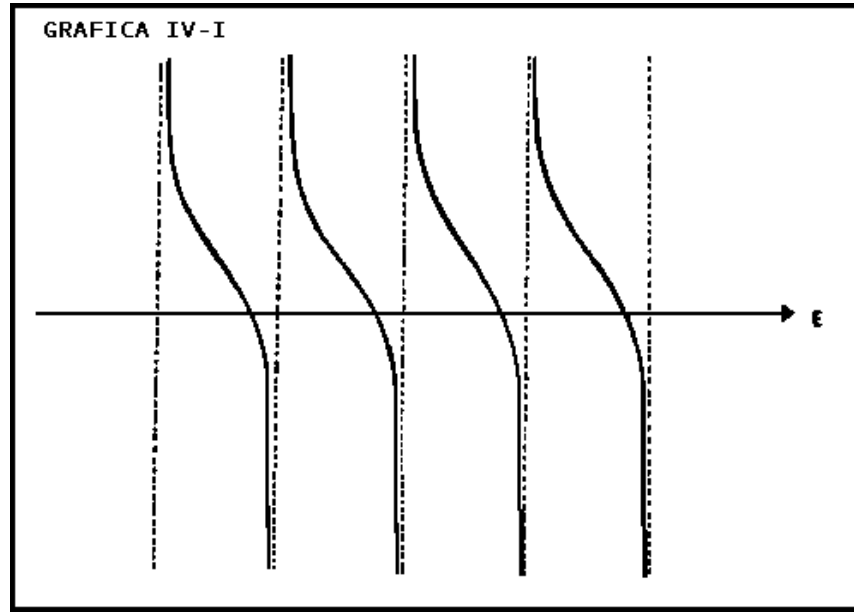
son dos polinomios en λ , entonces de (9.3) resulta que

$$\frac{P_1(\lambda)}{P_2(\lambda)} = \epsilon \quad (9.4)$$

Que es una fracción racional, que tiene raíces ceros y polos, en donde los ceros son las raíces de la cadena sin perturbar y los polos son las raíces de la cadena menos una partícula, esto es, de la cadena modificada.

Este resultado es análogo al obtenido en interacciones a primeros vecinos, en donde resulta el cociente de dos polinomios igualados a una constante.

Analizando (9.4) vemos que si $\epsilon = 0$ reducimos las raíces de la cadena, a las de la cadena sin modificación cuando $\epsilon \neq 0$ obtenemos otras raíces, por lo tanto la gráfica de la fracción racional (9.3) resulta de la forma siguiente.

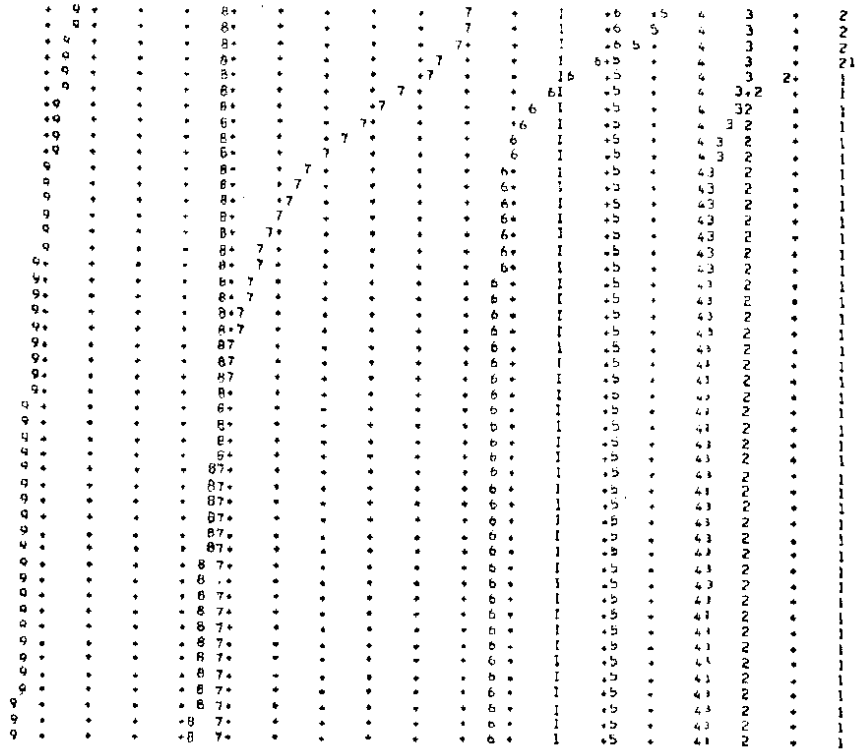


De este tipo de gráficas resultan, cuando comparamos los eigenvalores de una matriz y una submatriz, resultado conocido como teorema de alternación de eigenvalores (ref. [15]), que dice, que el espectro de eigenvalores de una submatriz queda comprendido entre el intervalo de eigenvalores de la matriz original, y además resultan de condiciones para la obtención de las frecuencias en interacciones a primeros vecinos.

9.2 Espectro de frecuencias.

De la misma forma que en los modelos anteriores, se obtuvo una gráfica de la variación de las frecuencias en función de la variación de una masa que crecía linealmente, esto es, gráfica (IX.II)

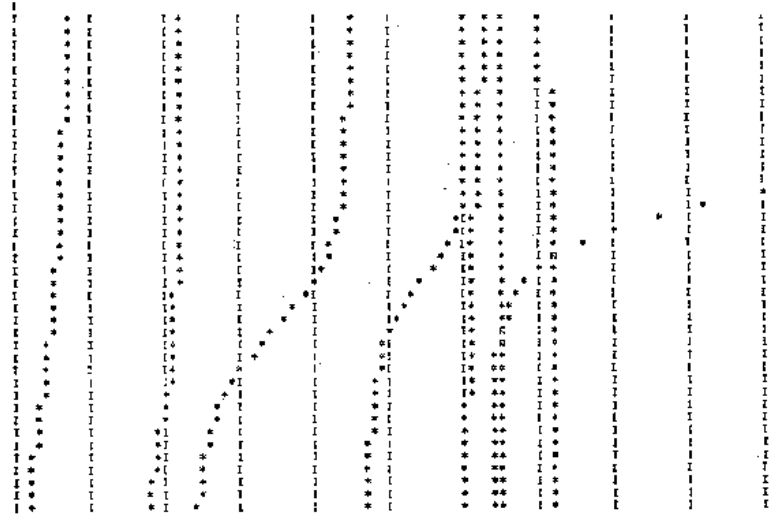
GRAFICA DE LAS EIGENFRECUENCIAS DE UNA CADENA DE EXTREMOS FIJOS Y CON INTERACCIONES A SEGUNDOS VECINOS



9.3 Modos normales de vibración.

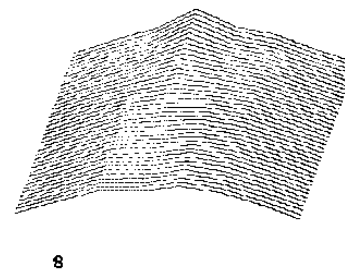
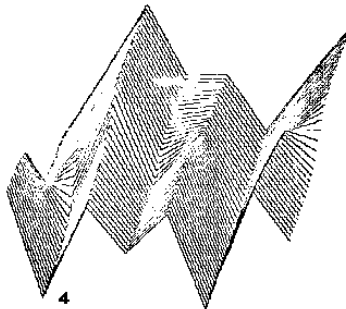
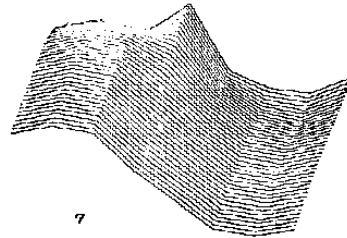
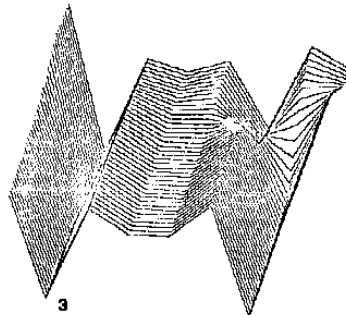
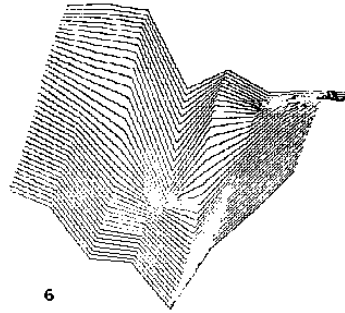
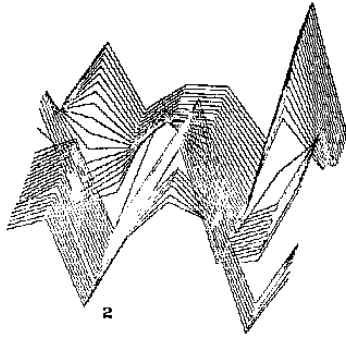
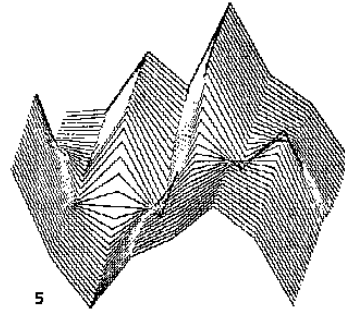
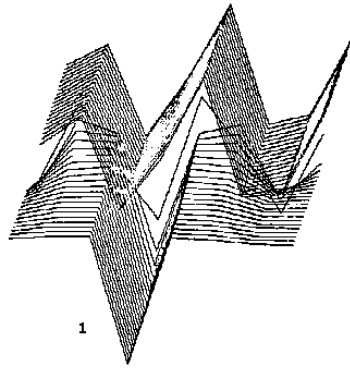
En este modelo, la gráfica del espectro de frecuencias (Gráfica IX-III) se lleva a cabo tomando como eje vertical las frecuencias y en el eje horizontal la variación del logaritmo del cociente de masas, la variación fue de 2/8 a 8 con incrementos de 0.194, en la gráfica de los modos normales de vibración (Gráfica IX-IV) tomamos como variable independiente (eje z) la variación del logaritmo del cociente de masas, en el eje y y los desplazamientos con perspectiva isométrica y el eje x como el número de partículas. En la serie de modos normales se puede apreciar que si el defecto es ligero, el modo de frecuencia más grande es localizado en el sentido de que tendrá una gran amplitud de vibración en el sitio del defecto y decae exponencialmente lejos del defecto. Este fenómeno es manifestado en el diagrama de dispersión por notar que el punto que representa la frecuencia más alta se mueve dentro de la región de números de ondas pertenecientes a ondas amortiguadas a medida que la severidad del defecto es aumentada. Si el defecto es pesado el modo de frecuencias más bajo casi no se mueve, este modo se mueve jalando a todos los demás, en el límite pueden desaparecer dependiendo de la masa. De la masa defectuosa dependerán los otros modos y que haya cruzamiento.

DIMENSION DE LA MATRIZ, N=8 NUMERO DEL ELEMENTO MODIFICADO, M=4



GRAFICA IX-III

GRAFICA IX-IV



9.4 Modificación de dos Partículas Interiores.

Habiendo visto que la modificación de únicamente una masa en la cadena con interacciones a segundos vecinos no produce una ecuación secular que sea particularmente interesante, se puede confiar en la experiencia adquirida con una cadena con interacciones a primeros vecinos, entonces es permitido modificar una masa en el extremo de una cadena, sin embargo, en cadenas con interacciones a segundos vecinos, se requiere la modificación de dos átomos para cortar la cadena.

Analizando la matriz de recursión

$$\begin{bmatrix} \gamma & \beta & \gamma & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

El término que depende en la masa es β a través de $\lambda m/K$. Por lo tanto el cambio de m a $m(1 + \delta)$ resulta en el cambio de β a $\beta + \delta\lambda m/K = \beta + \epsilon$.

Si cambiamos las masas i y $i + 1$, tenemos entonces la modificación siguiente

$$T_i \rightarrow T_i + \begin{bmatrix} 0 & \epsilon_i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} = T_i + \epsilon_2$$

$$T_{i+1} \rightarrow T_{i+1} + \begin{bmatrix} 0 & \epsilon_{i+1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} = T_{i+1} + \epsilon_1$$

y un segmento interior de los T productos contiene:

$$(T_{i+1} + \epsilon_2)(T_i + \epsilon_1) = T_{i+1}T_i + \epsilon_2T_i + T_{i+1}\epsilon_1 + \epsilon_2\epsilon_1$$

El último producto es cero, así que los términos dependiendo en ϵ son en forma matricial los siguientes:

$$\epsilon_2 \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \gamma & \beta & \gamma & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} + \epsilon_1 \begin{bmatrix} \gamma & \beta & \gamma & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} =$$

$$= \epsilon_2 \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} + \epsilon_1 \begin{bmatrix} 0 & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \epsilon_2 & \epsilon_1\gamma & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Si llamamos la matriz total no modificada por Q , al segmento del lado izquierdo por T y al segmento del lado derecho por t , resulta

$$Q' = Q + \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} & T_{14} \\ T_{21} & T_{22} & T_{23} & T_{24} \\ T_{31} & T_{32} & T_{33} & T_{34} \\ T_{41} & T_{42} & T_{43} & T_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \epsilon_2 & \epsilon_1\gamma & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t_{11} & t_{12} & t_{13} & t_{14} \\ t_{21} & t_{22} & t_{23} & t_{24} \\ t_{31} & t_{32} & t_{33} & t_{34} \\ t_{41} & t_{42} & t_{43} & t_{44} \end{bmatrix}$$

$$Q' = Q + \begin{bmatrix} T_{11}(\epsilon_2 t_{11} + \epsilon_1 \gamma t_{21}) + T_{12} \epsilon_1 t_{21} & T_{11}(\epsilon_2 t_{12} + \epsilon_1 \gamma t_{22}) + T_{12} \epsilon_1 t_{22} & \Delta & \Delta \\ T_{21}(\epsilon_2 t_{11} + \epsilon_1 \gamma t_{21}) + T_{22} \epsilon_1 t_{21} & T_{21}(\epsilon_2 t_{12} + \epsilon_1 \gamma t_{22}) + T_{22} \epsilon_1 t_{22} & \Delta & \Delta \\ & \Delta & \Delta & \Delta \\ & \Delta & \Delta & \Delta \end{bmatrix}$$

Por lo tanto el menor que determina la ecuación característica es

$$\begin{vmatrix} Q_{11} + \epsilon_2 T_{11} t_{11} + \epsilon_1 T_{12} t_{21} + \epsilon_1 \gamma T_{11} t_{21} & Q_{12} + \epsilon_2 T_{11} t_{12} + \epsilon_1 T_{12} t_{22} + \epsilon_1 T_{11} \gamma t_{22} \\ Q_{21} + \epsilon_2 T_{21} t_{11} + \epsilon_1 T_{22} t_{21} + \epsilon_1 \gamma t_{21} T_{21} & Q_{22} + \epsilon_2 T_{21} t_{12} + \epsilon_1 T_{21} t_{22} + \epsilon_1 \gamma T_{21} t_{22} \end{vmatrix} = 0$$

Los dos límites significantes ocurren, por supuesto cuando $\epsilon \rightarrow 0$ y $\epsilon \rightarrow \infty$. Pero $\epsilon = 0$, por supuesto que recuperamos la cadena sin modificar como se puede ver al hacer $\epsilon_1 = 0$ y $\epsilon_2 = 0$ en el determinante anterior. Para $\epsilon \rightarrow \infty$ podemos ignorar las Q 's, a menos cuando éstas no sean vitales para la obtención del determinante, esto es de su valor real.

Después de cierta álgebra resulta que la suma de las determinantes parciales para el caso en que $\epsilon \rightarrow \infty$ toma la forma

$$\begin{aligned} &= (\epsilon_2 t_{11} + \epsilon_1 \gamma t_{21})(\epsilon_1 t_{22}) \begin{vmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{vmatrix} + \epsilon_1 T_{21}(\epsilon_2 t_{12} + \epsilon_1 \gamma t_{22}) \begin{vmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{vmatrix} \\ &= \begin{vmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{vmatrix} \{(\epsilon_2 t_{11} + \epsilon_1 \gamma t_{21})(\epsilon_1 t_{22}) - (\epsilon_1 t_{21})(\epsilon_2 t_{12} + \epsilon_1 \gamma t_{22})\} \\ &= \begin{vmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \epsilon_2 t_{11} + \epsilon_1 \gamma t_{21} & \epsilon_2 t_{12} + \epsilon_1 \gamma t_{22} \\ \epsilon_1 t_{21} & \epsilon_1 t_{22} \end{vmatrix} \end{aligned}$$

Con lo cual resulta finalmente que la condición para obtener el espectro de eigenvalores cuando modificamos dos partículas en la cadena con interacciones a segundos vecinos es

$$Q'_{11} = \epsilon_1 \epsilon_2 \begin{vmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} t_{11} & t_{12} \\ t_{21} & t_{22} \end{vmatrix} = 0$$

Por lo tanto en el límite, nuestro determinante se reduce a λ^2 veces el producto de los polinomios característicos para los dos segmentos dentro de los cuales la cadena se separa.

Capítulo 10

COMPARACIÓN ENTRE ALGUNOS DE LOS MODELOS ANALIZADOS.

Lo que nos interesa es comparar cadenas cíclicas con cadenas finitas, pero con extremos libres y con extremos fijos. Del análisis anterior vemos que las variaciones de los modelos que deseamos analizar, dependen únicamente en los elementos matriciales de las esquinas de la matriz de movimiento M . Y se han aumentado elementos, principalmente en las esquinas de la matriz con objeto de poder utilizar la matriz de transferencia T , uniformemente en cualquier posición de la cadena; pero para efectuar estos cambios, que equivalen a prolongar la cadena con las mismas constantes es necesario suponer que existían dos partículas ficticias que permanecían sin movimiento, aún cuando tenían el mismo tipo de interacción con las demás partículas que se encuentran en el interior de una cadena.

Entonces de la foma como tenemos construidos los tres tipos de matrices referentes a los tres modelos mencionados anteriormente, es posible relacionar un modelo con otro y más que eso, podemos encontrar una relación entre los eigenvalores y eigenvectores de los tres modelos.

10.1 Comparación entre el modelo cíclico y el de extremos libres.

Así por ejemplo la diferencia entre el modelo cíclico (M_c) y el modelo del extremo libre (M_L) es una matriz que podemos calcular en la forma siguiente:

$$\begin{bmatrix} a_0 & a_1 & a_2 & \cdots & a_2 & a_1 \\ a_1 & a_0 & a_1 & a_2 & \cdots & a_2 \\ \vdots & & & & & \\ a_2 & & & & a_0 & a_1 \\ a_1 & a_2 & & & a_1 & a_0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} a'_0 & a_1 & a_2 & \cdots & 0 \\ a_1 & a''_0 & a_1 & a_2 & & \\ \vdots & & & & & \\ 0 & & & & a''_0 & a_1 \\ 0 & & & & a_1 & a'_0 \end{bmatrix} =$$

$$\begin{bmatrix} -(a_1 + a_2) & 0 & \cdots & a_2 & a_1 \\ 0 & -a_2 & & 0 & a_2 \\ \vdots & & & & \\ a_2 & 0 & & -a_2 & 0 \\ a_1 & a_2 & & 0 & -a_1 - a_2 \end{bmatrix} = D \quad (10.1)$$

Para obtener esta matriz, hemos usado algunas consideraciones ya mencionadas con anterioridad, como son: el hecho de que estamos tratando con un caso de interacciones a segundo vecinos, lo cual da lugar a que en la matriz del modelo libre aparezcan los parámetros nuevos a'_0 y a''_0 deducidos con anterioridad; otra cosa que se puede apreciar es que las matrices para el caso libre y cíclico, conservan la propiedad de que la suma de los elementos de cada renglón es cero y es claro que la diferencia entre ellos también conserva esta propiedad.

Además también podemos apreciar de la forma de la matriz D , que el vector que tiene todos sus elementos iguales a uno, es un eigenvector ya que si multiplicamos la matriz D por este vector, el resultado es que se va a sumar cada renglón y cada renglón sumado resulta cero, esto es:

$$\begin{bmatrix} -a_1 - a_2 & 0 & \cdots & a_2 & a_1 \\ 0 & -a_2 & \cdots & 0 & a_2 \\ \vdots & & & & \\ a_2 & 0 & & -a_2 & 0 \\ a_1 & a_2 & \cdots & 0 & -a_1 - a_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Por lo tanto estamos tratando con el eigenvector correspondiente al eigenvalor cero, lo cual quiere decir que los desplazamientos son los mismos para cada elemento de la cadena, por lo tanto a un anillo y una cadena libre les es permitido un movimiento de traslación de todos los elementos que los constituyen.

En el caso de la cadena, que está fija en sus extremos, no es aplicable lo anterior y por lo tanto el vector con componentes 1's, no es eigenvector, ya que en este caso no existen los elementos de las esquinas que se forman por efectos del caso libre (esto es el a'_0 y a''_0).

Ahora lo que nos interesa es analizar las propiedades de la matriz D , es posible obtener sus eigenvalores y eigenvectores en una forma inmediata, debido a que la parte del centro contiene puros ceros y por lo tanto únicamente una parte, que forma una matriz de 4×4 , es la que realmente nos interesa.

Para analizar la matriz D es conveniente factorizar en la forma siguiente.

$$D = -a_2 II + \begin{bmatrix} -a_1 & 0 & a_2 & a_1 \\ 0 & 0 & 0 & a_2 \\ a_2 & 0 & 0 & 0 \\ a_1 & a_2 & 0 & -a_1 \end{bmatrix} = D_1 - a_2 II$$

Los eigenvalores de la matriz D_1 se obtienen de

$$\begin{vmatrix} -a_1 - \varepsilon & 0 & a_2 & a_1 \\ 0 & -\varepsilon & 0 & a_2 \\ a_2 & 0 & -\varepsilon & 0 \\ a_1 & a_2 & 0 & -a_1 - \varepsilon \end{vmatrix} = 0 =$$

$$= -(a_1 + \varepsilon)\{-\varepsilon[-\varepsilon(-a_1 - \varepsilon)] + a_2[\varepsilon a_2]\} + a_2\{-a_2[-\varepsilon(-a_1 - \varepsilon) - a_2^2] + a_1[0]\} - \{\varepsilon(a_2)\}$$

Que es simplificado finalmente como

$$[\varepsilon(a_1 + \varepsilon) - a_2^2 + a_1\varepsilon][\varepsilon(a_1 + \varepsilon) - a_2^2 - a_1\varepsilon] = 0$$

Que se cumple si

$$[\varepsilon(a_1 + \varepsilon) - a_2^2 + a_1\varepsilon] = 0 \rightarrow \varepsilon^2 - 2a_1\varepsilon - a_2^2 = 0$$

$$[\varepsilon(a_1 + \varepsilon) - a_2^2 - a_1\varepsilon] = 0 \rightarrow \varepsilon^2 - a_2^2 = 0$$

Por lo tanto las raíces para estas ecuaciones son respectivamente

$$\begin{aligned} \varepsilon &= -a_1 \pm \sqrt{a_1^2 + a_2^2} \\ \varepsilon &= \pm a_2 \end{aligned} \quad (10.2)$$

Estos son los eigenvalores de la matriz D_1 , pero los que necesitamos son los de la matriz $D_1 - a_2II$ que son

$$\varepsilon_1 = 0; \quad \varepsilon_2 = -2a_2 \quad y \quad \varepsilon_{3,4} = -(a_1 + a_2) \pm \sqrt{a_1^2 + a_2^2}$$

Esto es debido a que el parámetro a_2 únicamente afecta a la diagonal de la matriz D y por consiguiente a sus eigenvalores; como se puede ver estos eigenvalores son todos “negativos”; para los eigenvalores ε_1 y ε_2 esta afirmación es clara, para los otros dos es necesario aplicar la desigualdad de Schwarz para comprobarlo, esto es:

Sabemos que

$$\begin{aligned} (a_1 + a_2)^2 &= a_1^2 + 2a_1a_2 + a_2^2 \\ (a_1 + a_2)^2 &> a_1^2 + a_2^2 \quad \text{por lo tanto} \\ (a_1 + a_2) &> \sqrt{a_1^2 + a_2^2} \end{aligned} \quad (10.3)$$

Con este resultado podemos concluir que los dos últimos eigenvalores son negativos. Entonces como todos los eigenvalores son negativos o cero, resulta que la matriz D es negativa semidefinida, es decir cumple la desigualdad.

$$(X, DX) \leq 0 \quad (10.4)$$

Por lo tanto la matriz D , que representa el problema cíclico menos el de extremos libres, proporciona una relación de orden sujeta a todas las propiedades aritméticas.

O sea que la matriz D , es la atriz que tiene que ser sumada a la matriz no-cíclica para obtener la cíclica, por esto, es conveniente encontrar una relación de orden entre los eigenvalores de la matriz cíclica (que denotamos M_c), con la matriz de extremos libres (que denotamos por M_L).

Partiendo de una relación anterior

$$M_c = D + M_L \quad (10.5)$$

Aplicando el producto interior a ambos lados de esta igualdad resulta

$$(x, M_c x) = (x, (D + M_L)x)$$

Como es lineal

$$(x, M_c x) = (x, Dx) + (x, M_L x)$$

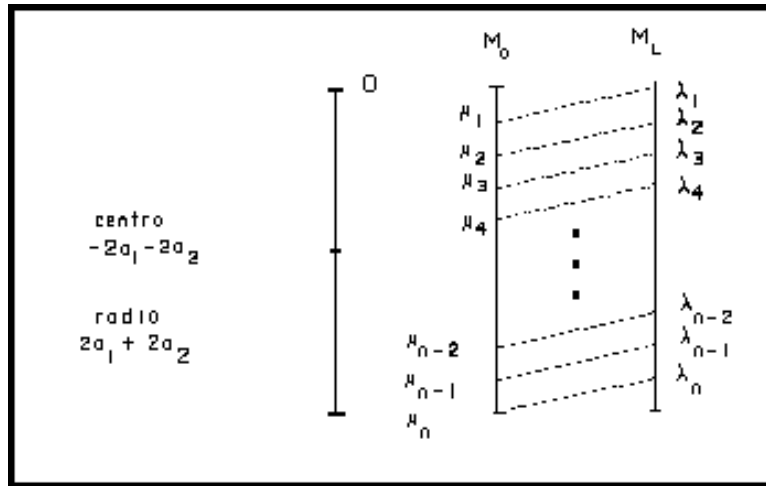
Aplicando el hecho de que D es una matriz negativa semidefinida, es decir se cumple que

$$\begin{aligned} (x, DX) &\leq 0 && \text{lo que implica} \\ (x, M_c x) &\leq (x, M_L x) \end{aligned}$$

con lo que resulta finalmente que

$$M_c \leq M_L$$

Este último resultado implica, que si ordenamos los eigenvalores algebraicamente y en parejas, en cada una de estas matrices, los eigenvalores de M_L siempre van a ser mayores que los de M_c . Este resultado se puede visualizar mejor en forma gráfica



Por lo tanto una onda de frecuencia alta es posible en el sistema cíclico. Para analizar los resultados anteriores es necesario usar el hecho de que

$$\frac{d^2 x_i}{dt^2} = \lambda x_i$$

Con lo cual se obtiene que

$$\omega = \pm i \sqrt{|\lambda|} \quad \text{que es la frecuencia}$$

Ya que siempre $\lambda < 0$ entonces la raíz cuadrada es imaginaria pura, lo cual es correcto, ya que las frecuencias que no son otra cosa que los exponentes, son imaginarios puros que conducen a una exponencial real de una onda, entonces, a mayor λ (en valor absoluto) la

frecuencia es mayor, pero también implica que el módulo es más negativo, esto quiere decir, que el sistema cíclico tiene frecuencias que son mayores, cada una de ellas, a las correspondientes al sistema con extremos libres; esto se puede apreciar cuando hacemos vibrar, a una barra y un anillo que tengan la misma longitud, el resultado es una desigualdad; esto para los primeros eigenvalores no pasa, ya que hemos visto que son cero y en los demás existe la posibilidad de que sean iguales.

10.2 Comparación entre el modelo cíclico y el de extremos fijos.

Comparemos el modelo cíclico (esto es, el anillo), con el modelo de extremos fijos (que denotamos M_f); en este caso tenemos que calcular

$$\begin{aligned}
 M_c - M_f &= \begin{bmatrix} a_0 & a_1 & a_2 & & \cdots & a_2 & a_1 \\ a_1 & a_0 & a_1 & a_2 & & & a_2 \\ a_2 & a_1 & a_0 & a_1 & a_2 & & \\ \vdots & & & & & & \\ a_2 & & & & & & a_2 \\ a_1 & a_2 & & & & & a_1 & a_0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} a_0 & a_1 & a_2 & & & & & \\ a_1 & a_0 & a_1 & a_2 & & & & \\ a_2 & a_1 & a_0 & a_1 & a_2 & & & \\ & & & \ddots & & & & \\ & & & & & & & a_0 & a_1 \\ & & & & & & & a_1 & a_0 \end{bmatrix} \\
 &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & & \cdots & a_2 & a_1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & & a_2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \\ \vdots & & & & & & \vdots \\ a_2 & & & & & & 0 \\ a_1 & a_2 & & & & & 0 & 0 \end{bmatrix} = D_{cf} \tag{10.6}
 \end{aligned}$$

Como vemos el cálculo de los eigenvalores es inmediato, ya que la parte central de la matriz diferencia (D_{cf}) contiene puros ceros, por lo tanto la matriz 4×4 es la que nos interesa; esto es:

$$\begin{vmatrix} -\mu & 0 & a_2 & a_1 \\ 0 & -\mu & 0 & a_2 \\ a_2 & 0 & -\mu & 0 \\ a_1 & a_2 & 0 & -\mu \end{vmatrix} = 0 = \mu^2 \begin{vmatrix} -\mu & a_2 \\ a_2 & -\mu \end{vmatrix} - a_2^2 \begin{vmatrix} -\mu & a_2 \\ a_2 & -\mu \end{vmatrix} - a_1 \mu \begin{vmatrix} a_2 & -\mu \\ a_1 & 0 \end{vmatrix}$$

Que es simplificado finalmente como

$$(\mu - a_1\mu - a_2^2)(\mu^2 - a_2^2 + a_1\mu) = 0$$

por lo tanto las raíces serán:

$$\begin{aligned}
 \mu_{1,2} &= \frac{a_1 \pm \sqrt{a_1^2 + 4a_2^2}}{2} \\
 \mu_{3,4} &= \frac{-a_1 \pm \sqrt{a_1^2 + 4a_2^2}}{2}
 \end{aligned}$$

Como vemos las raíces ocurren en parejas negativas, ya que $\mu_1 = -\mu_4$ y $\mu_2 = -\mu_3$ como tenía que esperarse de una matriz antisimétrica.

Por lo tanto la transición del modelo cíclico al de extremos fijos no se puede llevar a cabo por adición de una transformación “definida”. Además la matriz D_{cf} dada por (10.6) tiene traza cero por lo tanto no puede ser definida.

10.3 Comparación entre el modelo libre con el de fijos.

Relación de eigenvalores entre el modelo de extremos fijos (M_f) con el de extremos libres (M_L) tenemos que calcular

$$M_L - M_f = \begin{bmatrix} a'_0 & a_1 & a_2 & & & \\ a_1 & a''_0 & a_1 & a_2 & & \\ a_2 & a_1 & a_0 & a_1 & a_2 & \\ \vdots & & & & & \\ 0 & & & & & a_1 \\ 0 & & & & a_1 & a_0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} a_0 & a_1 & a_2 & & & \\ a_1 & a_0 & a_1 & a_2 & & \\ a_2 & a_1 & a_0 & a_1 & a_2 & \\ \vdots & & & & & \\ & & & & & a_1 \\ & & & & a_1 & a_0 \end{bmatrix} = D_{Lf} \quad (10.7)$$

Por lo tanto la matriz diferencia toma la forma

$$D_{Lf} = \begin{bmatrix} a_1 + a_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a_1 + a_2 \end{bmatrix}$$

Calculando los eigenvalores, para ver que tipo de matriz es

$$\begin{vmatrix} a_1 + a_2 - \mu & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_2 - \mu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a_2 - \mu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a_1 + a_2 - \mu \end{vmatrix} = 0$$

Por lo consiguiente:

$$(a_1 + a_2 - \mu)^2 (a_2 - \mu)^2 = 0$$

Con lo cual las raíces son

$$\begin{aligned} \mu_{1,2} &= a_1 + a_2 \\ \mu_{3,4} &= a_2 \end{aligned}$$

Por lo tanto podemos concluir que la matriz D_{Lf} es positiva definida, esto es cumple que

$$(x, D_{Lf}x) \geq 0$$

Ahora de la relación dada por (10.7) resulta

$$M_L = M_f + D_{Lf} \quad (10.8)$$

Aplicando el producto interior a ambos lados de esta igualdad tenemos que:

$$(x, M_L x) = (x, (M_f + D_{L_f})x)$$

Debido a la linealidad del producto interior, resulta que

$$(x, M_L x) = (x, D_{L_f} x) + (x, M_f x)$$

Aplicando el resultado, de que la matriz D_{L_f} es positiva definida.

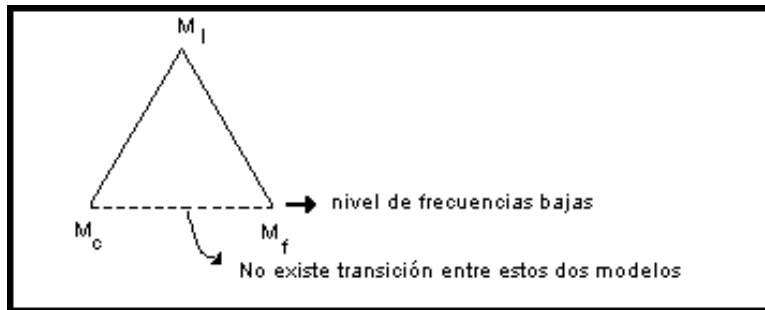
$$(x, M_L x) \geq (x, M_f x)$$

resulta finalmente

$$M_L \geq M_f \tag{10.9}$$

O sea podemos concluir, que cuando ordenamos los eigenvalores en parejas, los eigenvalores del modelo libre siempre son mayores que los del modelo de los extremos fijos.

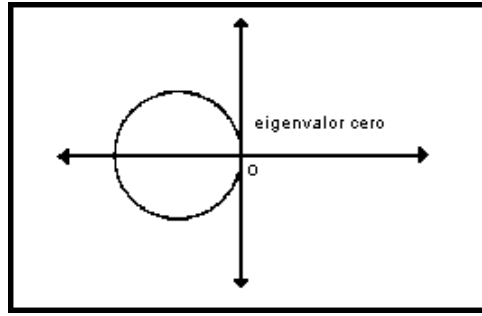
Por lo tanto de acuerdo con el rango de eigenvalores, podemos representar los resultados de estos tres modelos en la forma siguiente.



10.4 Análisis de los elementos de la matriz de movimiento en términos de matrices definidas.

Anteriormente vimos un teorema, el cual nos permite obtener un disco, cuyo centro es el valor del elemento diagonal principal y radio la suma de los valores absolutos de los demás elementos que están sobre un renglón fuera de la diagonal principal, así se tienen discos, en los cuales existe la posibilidad de tener el eigenvalor en el interior de alguno de ellos.

Lo importante del resultado que se obtiene, cuando la suma de los elementos de un renglón es cero, es no sólo que nos permite encontrar que $\lambda = 0$ es un eigenvalor, sino además que los elementos en la diagonal principal son negativos, por lo cual si consideramos un plano sobre el cual se encuentre el disco, tendremos que en este caso, se encontrará en el lado izquierdo, entonces se pueden tener varios discos, si los renglones son distintos, pero todos quedarán en la mitad izquierda del plano, esto es.



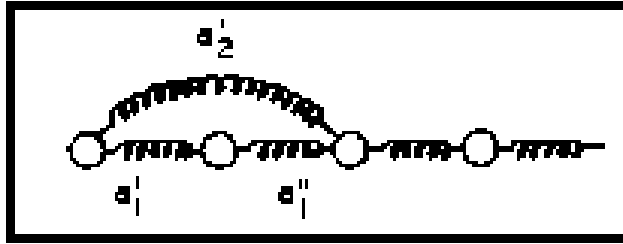
Por lo tanto se tiene que cero es un eigenvalor y que todos los demás están a la izquierda del plano y en el interior del disco, como se puede apreciar del diagrama; entonces sabemos que todos los λ 's son negativos, por lo tanto se tiene que la matriz es negativa semidefinida, la cual es una condición necesaria y suficiente, que está en concordancia con el álgebra matricial, ya que se dice que una matriz simétrica es negativa semidefinida, si y solo si todos sus eigenvalores son negativos.

Por lo tanto la posición del disco depende de los signos relativos, del elemento de la diagonal principal y de los que están fuera de la diagonal principal; también los cambios en los signos relativos dan lugar a los cambios en los eigenvalores.

Por otra parte la estabilidad de una red (ver Ref. [6]), se supone que es asociada con una forma cuadrática positiva definida para la energía de tensión. En el caso de un continuo unidimensional que es el que estamos analizando, la condición de estabilidad degenera al requisito simple de un módulo de Young positivo, el cual puede expresarse como función de las constantes de fuerza k y k' o bien por los elementos matriciales a_0 , a_1 y a_2 ; esto es llevado a cabo por expandir los desplazamientos en series de Taylor y retener términos cuadráticos comparados con la distancia interatómica.

En nuestro modelo, se puede demostrar que el módulo de Young depende de los signos relativos de a_1 , esto es, en el caso de que $a_1 > 0$ se dice que la red es estable. Cuando $a_2 = -a_1$ se tiene un equilibrio crítico, ya que este en este caso las fuerzas atractivas y repulsivas casi serán iguales (esto pasa en la frontera). En el caso de que $a_0 < 0$ existe mayor atracción con lo cual hay mayor estabilidad, entonces a_0 tiene que ser negativo, esto puede deducirse de condiciones físicas, en el sentido de la clase de equilibrio que se tenga, es decir, elástico o estático.

Por lo tanto lo anterior depende del hecho de que, los elementos de un renglón sumados o restados nos hagan cero el renglón, esto no se puede asegurar completamente en todos los modelos, pero lo que sí se puede asegurar es que todos los eigenvalores van a subir o bajar, particularmente se puede aplicar al caso cuando la frontera es suave o dura, se puede pensar que debido a la falta de átomos de un lado de la cadena o de un sólido en general, las fuerzas de atracción son más grandes (esto es conocido por resultados experimentales), ya que si las fuerzas repulsivas fueran las mayores, tendríamos una frontera difusa, podemos suponer que en la frontera la superficie es más densa lo cual quiere decir que $a'_1 > a_1$ y que $a'_2 > a_2$; por lo tanto va a ser necesario modificar la matriz por el cambio de estos tres elementos, e igualmente si se desea hacer el cambio en la frontera opuesta; entonces vamos a considerar una cadena con interacciones, en la forma siguiente



Por lo tanto tendremos una submatriz 3×3 en cada una de las esquinas, representando la perturbación en sus extremos respectivos. Con objeto de simplificar el álgebra únicamente consideraremos la perturbación en un extremo, esto es.

La matriz sin perturbar

$$M = \begin{bmatrix} a_0 & a_1 & a_2 & & & & \\ a_1 & a_0 & a_1 & a_2 & & & \\ a_2 & a_1 & a_0 & a_1 & a_2 & & \\ 0 & a_2 & a_1 & a_0 & a_1 & a_2 & \\ \vdots & & & & & & \ddots \end{bmatrix}$$

Por lo tanto la submatriz con la perturbación tiene la forma

$$M' = \begin{bmatrix} -a'_1 - a'_2 & a'_1 & a'_2 \\ a'_1 & -a'_1 - a'_2 & a''_1 \\ a'_2 & a''_1 & -a'_2 - a''_1 \end{bmatrix}$$

Para obtener la ecuación característica y por lo tanto los eigenvalores hagamos: $a'_1 = a$; $a'_2 = b$ y $a''_1 = c$; con lo que la ecuación característica toma la forma

$$\begin{vmatrix} -a - b - \lambda & a & b \\ a & -a - c - \lambda & c \\ b & c & -b - c - \lambda \end{vmatrix} = 0$$

$$\lambda[\lambda^2 + 2\lambda(a + b + c) + 3(ab + bc + ac)] = 0 \rightarrow$$

$$\lambda_1 = 0$$

$$\lambda_{2,3} = -(a + b + c) \pm \sqrt{a^2 + b^2 + c^2 - (ab + bc + ac)} \quad (10.10)$$

Ahora lo que nos interesa, es ver si estos eigenvalores $\lambda_{2,3}$ son negativos, para esto calculemos explícitamente

$$(a + b + c)^2 = a^2 + b^2 + c^2 + 2(ab + ac + bc)$$

Por lo tanto:

$$\begin{aligned} (a + b + c)^2 &> a^2 + b^2 + c^2, && \text{cuando } ab + ac + bc > 0 \\ (a + b + c)^2 &> a^2 + b^2 + c^2 - (ab + bc + ac) \end{aligned}$$

Resultando finalmente que

$$|a + b + c| > \sqrt{a^2 + b^2 + c^2 - (ab + ac + bc)}$$

Analizando este resultado, junto con (10.10) vemos que los eigenvalores $\lambda_{2,3}$ son negativos, lo cual quiere decir que la matriz M' para este caso es negativa semidefinida. Por lo tanto tal situación siempre tiene que ocurrir, cuando la suma-renglón es cero y los elementos son positivos.

Supongamos que hacemos los resortes extremos más fuertes al sumar esta matriz negativa semidefinida, entonces lo que va a ocurrir es que únicamente podemos bajar los eigenvalores, (elevándose las frecuencias) como es apropiado a resortes duros, esto es, a superficies duras. Recíprocamente, una superficie suave bajará las frecuencias, lo que corresponde a que los eigenvalores (negativos) crezcan.

También notamos que la misma consideración se aplica a la interacción de primeros y segundos vecinos; si a_2 es positivo todas las frecuencias crecerán.

Prosiguiendo con esta idea, que pasará si λ es medida en unidades de $4(a_1 + a_2)$ y a_2 se incrementa, entonces $\xi = -\lambda/4(a_1 + a_2)$ puede o no crecer, o puede anularse, tal consideración no se aplica al interior de la cadena en donde a_1 y a_2 permanecen constantes, cuando las a 's extremas se modifican.

Por lo tanto hasta cierto límite se puede aplicar el teorema de comparación de eigenvalores.

Así cuando se hacen cambios en las dos esquinas opuestas a la diagonal, pero sin modificar los términos del interior, lo cual da lugar a que el disco quede centrado en el origen, (en lugar de estar situado en el semiplano negativo) lo que implicará que algunos eigenvalores resulten positivos y otros negativos, entonces las frecuencias en un caso van a bajar y en el otro van a subir, pero en partes distintas del espectro; como vemos va a existir una gran cantidad de consideraciones, así que el cambio de un elemento de la matriz, nos da la posibilidad de un aumento de algunos eigenvalores y la disminución de otros, dependiendo del grado de la perturbación; si ajustamos el elemento diagonal, al mismo tiempo, podemos darnos cuenta que todos los eigenvalores van en la misma dirección, lo cual es razonable, ya que sumar a la diagonal, equivale a sumar algo a los eigenvalores.

Si siguiendo con esta idea, veamos que pasa si cambiamos los elementos de la frontera de la diagonal principal, esto es

$$\begin{bmatrix} a_0 & a_1 & a_2 & & \cdots \\ a_1 & a'_0 & a_1 & a_2 & \\ a_2 & a_1 & a''_0 & a_1 & a_2 \\ & a_2 & a_1 & a_0 & a_1 & a_2 \\ \vdots & & & & & \end{bmatrix} \quad \text{En donde} \quad \begin{aligned} a_0 &= -2a_1 - 2a_2 \\ a'_0 &= -a_1 - a_2 \\ a''_0 &= -2a_1 - a_2 \end{aligned}$$

para poder emplear el criterio, de que la suma de los elementos a través de un renglón sea cero, es necesario suponer que la submatriz 3×3 que vamos a analizar, tiene la forma siguiente:

$$\begin{bmatrix} a'_0 & a_1 & a_2 \\ a_1 & a''_0 - a'_0 & 0 \\ a_2 & 0 & a_0 - a''_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -a_1 - a_2 & a_1 & a_2 \\ a_1 & -a_1 & 0 \\ a_2 & 0 & -a_2 \end{bmatrix}$$

Calculando la ecuación característica, con objeto de determinar el tipo de matriz, resulta:

$$\begin{vmatrix} -a_1 - a_2 - \xi & a_1 & a_2 \\ a_1 & -a_1 - \xi & 0 \\ a_2 & 0 & -a_2 - \xi \end{vmatrix} = \xi(\xi^2 + 2\xi(a_1 + a_2) + 3a_1a_2) = 0$$

Por lo tanto las raíces serán:

$$\begin{aligned} \xi_1 &= 0 \\ \xi_{2,3} &= -(a_1 + a_2) \pm \sqrt{(a_1 - a_2)^2 + a_1a_2} \end{aligned}$$

Por un álgebra similar a la anterior resulta que

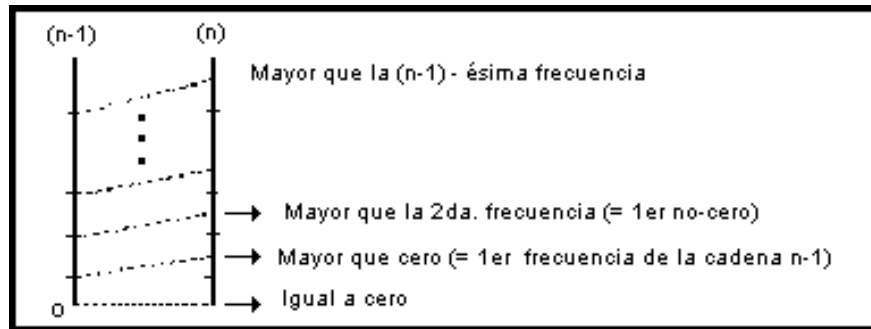
$$|a_1 + a_2| > \sqrt{a_1^2 + a_2^2 - a_1a_2}$$

O sea podemos concluir que nuestra matriz es negativa semidefinida. Por lo tanto tenemos el arreglo matricial siguiente

$$\begin{bmatrix} 0 \\ \text{Cadena libre} \\ \text{con (n-1)} \\ \text{partículas} \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} a'_0 & a_1 & a_2 \\ a_1 & a''_0 - a'_0 & 0 \\ a_2 & 0 & a_0 - a''_0 \\ \vdots & & \\ 0 & & \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \text{Cadena libre} \\ \text{con (n)} \\ \text{partículas} \end{bmatrix}$$

(negativa semidefinida)

Desde luego que la matriz suma es negativa, además cada frecuencia de la cadena con (n) partículas es mayor que la correspondiente frecuencia de la cadena con $(n - 1)$ partículas, resultado análogo al teorema de alternación de eigenvalores (Ref. [15]), gráficamente tendremos

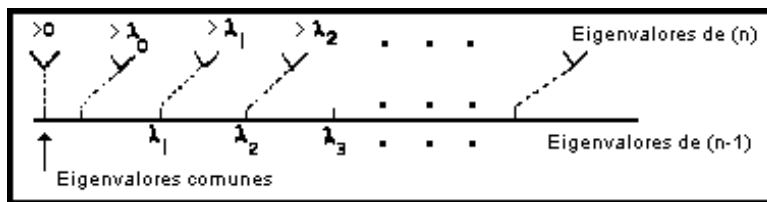


Si empleamos el teorema de alternación de eigenvalores para una submatriz, tendremos



Sin embargo, el teorema sólo no nos permite simultáneamente modificar los elementos matriciales diagonales, así que la matriz negativa semidefinida es necesaria después de todo. Sin embargo, eso nos da una desigualdad, pero no confina el intervalo (podríamos obtener el mismo teorema, aún con una enorme perturbación, así que allí puede no existir confinamiento).

Por lo tanto el teorema en forma gráfica tiene la forma



Capítulo 11

RESUMEN Y CONCLUSIONES

Como hemos visto a través del desarrollo de este trabajo, se ha seguido con la aproximación armónica en la consideración de redes dinámicas con interacciones a segundos vecinos, ya que el estudio que involucra interacciones a primeros vecinos, ha sido estudiado extensamente y ha servido como base para conclusiones que consideran algunas propiedades termodinámicas y físicas de redes cristalinas. Esta aproximación armónica es sujeta al hecho bien conocido de “efectos” no lineales.

La otra aproximación que es muy importante y que fue considerada (Cap. 9) es la de efectos superficiales, (que son ignorados completamente en la aproximación de Born - von Kármán) que son más importantes y realistas claramente en modelos tridimensionales que en unidimensionales. Debido a que los efectos superficiales se asemejan considerablemente a los efectos debidos a defectos en redes y además debido a que son completamente importantes en muchas áreas de aplicación, pusimos atención particular a las propiedades de las superficies y defectos de varios tipos, que aún cuando su estudio se aplicó a modelos unidimensionales se trató de prepararlo para su aplicación a modelos de más dimensiones.

La primera parte de este estudio estuvo enfocada al estudio matemático del modelo, por supuesto que el primer objetivo del estudio fue el de considerar una cadena uniforme, que es la configuración más simétrica y que nos sirvió como base para que todas las demás configuraciones fueran elaboradas. En esta parte, lo único que nos interesó fue la obtención de un modelo general el cual fuera susceptible de cambios, es decir, que fuera capaz de darnos información de las distintas configuraciones que fueran elaboradas, por lo tanto en esta primera parte se obtuvieron conceptos generales, como el de la matriz de movimiento, el de frecuencias, modos normales, el de la matriz de transferencia, y algunos teoremas que fueron bastante importantes para el desarrollo de las demás configuraciones o modelos particulares.

El otro tipo de aproximación que se encuentra en la literatura y que nos sirvió de base para hacer algunas comparaciones, para poder sacar conclusiones, es la aproximación de interacciones a primeros vecinos, nosotros decidimos hacer un examen explícito de la pequeña relación que se encuentra entre modelos con diferentes rangos de interacción, aún cuando nos hemos concentrado más en la pequeña relación entre el modelo de primeros vecinos y

el modelo de segundos vecinos; esto es debido a que por variar la razón de constantes de interacción de primeros y segundos vecinos es posible efectuar una transición continua entre un estado en que prevalecen las interacciones a primeros vecinos a otro en que existe únicamente interacciones a segundos vecinos; el extremo de únicamente interacciones a segundos vecinos da lugar a la colección de “dos” sistemas que no interactúan con interacción a primeros vecinos únicamente. Por lo tanto este es un límite que reduce una configuración desconocida, a una configuración familiar bien entendida y que nos permite considerar un sistema en que un tipo de interacciones predomina pero que no excluye a la otra como una perturbación del sistema con puras interacciones. En efecto se encontró que la dinámica de una red intermedia es algo más que la interpolación de estos dos extremos.

También parece que la dinámica de una red con interacciones a segundos vecinos es una buena indicadora de la dinámica de redes con distancias más lejanas de interacción, en el sentido de que no puede llevar a cabo interpolaciones similares sea cual sea la distancia de interacción.

Una vez conocida la técnica matemática se trató de encontrar algunos resultados interesantes de modelos particulares, el primero de los cuales fue el de la red cíclica (anillo), en los cuales los efectos superficiales no existen, lo que permite poder establecer un contraste con respecto a redes con interacciones a vecinos lejanos, en que los efectos superficiales son considerablemente más importantes. Otra vez tenemos una correlación cerrada entre la influencia de efectos en la red y la influencia de superficies. En una red cíclica, el espectro de frecuencias, los eigenvectores y otras propiedades pueden ser realmente extrapoladas de redes con interacciones a primeros vecinos, en efecto todos los eigenvectores corresponden a ondas periódicas y son en gran número los mismos, cualquiera que sea la distancia de interacción, por lo que respecta a la relación de dispersión, encontramos que es un polinomio trigonométrico, más que una simple función trigonométrica.

Pero otra vez lo que es completamente indicativo de tendencias generales son las redes con diferentes clases de defectos puntuales, los defectos básicos son defectos de masas en que la masa de una simple partícula es variada mientras que las otras masas y resortes permanecen fijas, y defectos en resortes en que una simple constante es variada. Más variaciones complejas pueden ser construidas por la repetida aplicación de las variaciones básicas, sin embargo es convenientemente útil considerar otras clases particulares con más detalle.

Otros resultados que se obtuvieron con estos defectos puntuales, es que existen algunos teoremas matriciales, que pueden ser empleados para definir los cambios en el espectro de eigenvalores, o en los eigenvectores. Pero algunas veces encontramos que estos teoremas no han sido aplicados eficientemente, aún en el caso de interacciones a primeros vecinos, algunos de estos son los teoremas de alternación de eigenvalores y el de fijos, en que las frecuencias normales de una red son empleados para establecer intervalos que tienen que contener las frecuencias de una red relativa. Por lo tanto se obtuvieron límites para las frecuencias de una cadena con una partícula adicional, lo mismo cuando los elementos matriciales son modificados debido a la presencia de defectos puntuales y en general debido a las condiciones de una configuración particular como las que analizamos en el transcurso del trabajo; aunque estos teoremas han sido conocidos y empleados para redes con interacciones a primeros vecinos, encontramos que cuando son analizados cuidadosamente, pueden ser usados para obtener el espectro de una cadena dada, por interpolación entre dos simples y bien definidas configuraciones interpretables.

Otra cosa que se desprende del análisis anterior es que, cuando existen pocos defectos en una red, se puede estimar su efecto acumulativo por repetidas aplicaciones de los teoremas mencionados, sin embargo, cuando los defectos son numerosos, es generalmente más satisfactorio estudiar a todos ellos simultáneamente; por ejemplo podemos mencionar, una cadena desordenada en que los átomos son mezclados al azar, o redes en las cuales sus masas varían en una forma sistemática, por ejemplo cuando las masas de cada partícula pueden incrementarse uniformemente de un extremo de la cadena a el otro.

Una de las configuraciones que se analizaron y que es un ejemplo importante de una cadena no uniforme, pero aún con una regularidad bien definida, es la cadena diatómica en la que las partículas tienen dos masas distintas y los átomos ligeros alternan con los átomos pesados. El resultado más característico y que concuerda con la literatura es la obtención de dos bandas la acústica y la óptica con un rango de frecuencias prohibidas en el sentido de que no hay frecuencias normales posibles dentro de este rango y que la propagación de ondas a través de la red en estas frecuencias es amortiguado. Los defectos puntuales en una red diatómica, o efectos superficiales pueden dar lugar a modos normales cuyas frecuencias están situadas en el rango prohibido, lo cual significa que ellos tienen que ser modos superficiales con una amplitud que es mucho mayor cerca de la superficie del defecto pero que se atenúa exponencialmente lejos del máximo. La generalización eventual del estudio de defectos de átomos en una red diatómica da lugar a información aplicable a redes poliatómicas o desordenadas.

Una cosa muy importante de hacer notar es el estudio que se hizo del defecto de las varias condiciones a la frontera de estos diferentes modelos, ya que en redes unidimensionales la variación de condiciones a la frontera es una cuestión de la misma clase que el estudio de defectos puntuales, es por esto que no recibe un apreciable y diferente análisis, las condiciones a la frontera que se introdujeron son con respecto al modelo de extremos fijos, el caso del anillo y el modelo de extremos libres.

Otro concepto que fue de vital importancia en este estudio, es el de ondas viajeras, el cual puede ser fácilmente generalizado a redes de más dimensiones. La idea de una onda se originó del hecho de que uno puede representar las componentes de los modos normales (eigenvec-tores) como funciones trigonométricas, (senos y cosenos) de la posición de cada partícula a lo largo de la longitud de la cadena en vibración y al mismo tiempo la variación temporal del desplazamiento de cada partícula es expresado en términos de exponenciales complejas. Por otra parte un método que fue bastante utilizado en el desarrollo de los modos normales, fue el método de matriz de transferencia, introducido en el libro de Brillouin y explotado sistemáticamente por Matsuda y su escuela. Este método es idealmente conveniente para la descripción en vibraciones de redes. La matriz de transferencia naturalmente que surge, como se vió en el transcurso del trabajo, de expresar el polinomio característico de la matriz de coeficientes, en las ecuaciones de movimiento de la red en forma recursiva también mencionamos que para el caso de interacciones a primeros vecinos la matriz de coeficientes resultaba tridia-gonal, para el caso que tratamos resultó, pentadiagonal cuando ellas se extienden a terceros vecinos y así sucesivamente.

Algunos resultados importantes que se obtuvieron y que no se mencionaron en el resumen anterior son. El hecho de que los modos normales dependen de la suma de $2n$ ondas viajeras, cuando hay n interacciones entre las partículas, para el caso concreto que estamos analizando los modos normales dependerán de 4 ondas viajeras. De la misma forma se encontró que hay una máxima degeneración límite " n " presente, en la presencia de interacciones a n vecinos,

por lo que respecta a este punto únicamente se da la demostración para el caso de segundos vecinos en este estudio, aún cuando se cuenta con la demostración para primeros y terceros vecinos.

Otro resultado que se obtuvo que el hecho de que el ordenamiento de las frecuencias por el número de onda, que es característico de cadenas con interacciones a primeros vecinos se “pierde”, en parte porque hay n números de onda que considerar, a menudo uno de ellos será dominante, y es posible que trace tendencias en un diagrama de dispersión, lo cual permite que en cualquier evento uno puede analizar la estructura de los modos normales, como se hizo en la discusión de los mismos. En estos diagramas se observa que el modo normal de frecuencias más bajas está siempre sin nodos, (en este caso únicamente hay una traslación de todas las partículas de la cadena); pero cuando hay interacciones a vecinos más lejanos predomina el segundo modo más bajo el cual puede tener el máximo número de nodos. Cuando $n = 1$, los resultados son debidos a la teoría de Sturm-Liouville, además muchas de las propiedades que se encuentran en interacciones a primeros vecinos persisten para segundos vecinos, aunque en alguna forma modificada.

Se encontró además que los defectos puntuales producen modos localizados de frecuencia alta. Las redes diatómicas presentaron una banda óptica y una acústica aunque ellas pueden traslaparse en algunas regiones y la banda óptica puede bifurcarse en otras, y cadenas no uniformes mostraron modos localizados de frecuencias altas.

También se obtuvieron algunas desigualdades entre los modelos analizados una de las cuales es una relación de orden entre los eigenvalores; esto nos permite afirmar que si ordenamos los eigenvalores algebraicamente y en parejas, los eigenvalores para el caso del modelo de extremos libres siempre van a ser mayores que los del caso cíclico y que los del caso de extremos fijos, la comparación entre el modelo de extremos fijos y del anillo no pudo llevarse a cabo por adición de una transformación definida, ya que resultaba una matriz de traza cero lo cual indica que es una matriz indefinida.

Finalmente se puede observar fácilmente que existen otros sistemas no relacionados con estos modelos, pero que dan lugar a matrices de bandas diagonales, como las de nuestro modelo, por lo tanto la mayoría de nuestras conclusiones son aplicadas a todos esos sistemas.

Apéndice A

Solución del determinante ε , definido como:

$$\varepsilon = \begin{vmatrix} \varepsilon_1^3 & \varepsilon_2^3 & \varepsilon_3^3 & \varepsilon_4^3 \\ \varepsilon_1^2 & \varepsilon_2^2 & \varepsilon_3^2 & \varepsilon_4^2 \\ \varepsilon_1 & \varepsilon_2 & \varepsilon_3 & \varepsilon_4 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{vmatrix}$$

La forma general de este determinante, está dado por el determinante de Vandermonde, esto es:

$$\Delta = \begin{vmatrix} a_1^n & a_2^n & a_3^n & \cdots & a_{n+1}^n \\ a_1^{n-1} & a_2^{n-1} & a_3^{n-1} & \cdots & a_{n+1}^{n-1} \\ a_1^{n-2} & a_2^{n-2} & a_3^{n-2} & \cdots & a_{n+1}^{n-2} \\ \vdots & & & & \\ a_1 & a_2 & a_3 & \cdots & a_{n+1} \\ 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \end{vmatrix} = \prod_{\substack{i=1 \\ j>i}}^{n-1} (a_i - a_j)$$

lo que se quiere demostrar es que este determinante tiene la forma

$$\Delta = (a_1 - a_2)(a_1 - a_3) \cdots (a_1 - a_n)(a_2 - a_3)(a_2 - a_4) \cdots (a_2 - a_n) \cdots (a_{n-1} - a_n)$$

Para demostrar este resultado, nos basamos en una propiedad de los determinantes, lo cual nos permite multiplicar cualquier renglón del determinante por un escalar y sumarlo o restarlo a otro sin cambiar el valor del determinante, lo que en realidad se trata de hacer, es poner el determinante en forma diagonal, para esto es necesario que los elementos de este determinante diagonal, sean polinomios mónicos es decir, polinomios en los que el coeficiente de la potencia más alta es uno.

Multipliquemos el determinante por los coeficientes $\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_{n-1}$ en la forma siguiente:

$$\Delta = \begin{vmatrix} & a_1^n & a_2^n & a_3^n & \cdots & a_{n+1}^n \\ \alpha_{n-1} & a_1^{n-1} & a_2^{n-1} & a_3^{n-1} & \cdots & a_{n+1}^{n-1} \\ \alpha_{n-2} & a_1^{n-2} & a_2^{n-2} & a_3^{n-3} & \cdots & a_{n+1}^{n-2} \\ \vdots & \vdots & & & & \\ \alpha_2 & a_1^2 & a_2^2 & a_3^2 & \cdots & a_{n+1}^2 \\ \alpha_1 & a_1 & a_2 & a_3 & \cdots & a_{n+1} \\ \alpha_0 & 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \end{vmatrix}$$

Sumando los renglones que se multiplicaron, al primer renglón, resulta que cada elemento del primer renglón, está formado por polinomios mónicos, es decir polinomios mónicos $P_n(x)$ de grado n , evaluados en los puntos a_1, a_2, \dots, a_{n+1} .

Estos polinomios mónicos son de la forma.

$$P_i(a_i) = \sum_{j=0}^n \alpha_j a_i^j \quad \alpha_n = 1$$

Por lo tanto el determinante de Vandermonde queda:

$$\Delta = \begin{vmatrix} P_n(a_1) & P_n(a_2) & \cdots & P_n(a_{n+1}) \\ a_1^{n-1} & a_2^{n-1} & \cdots & a_{n+1}^{n-1} \\ \vdots & & & \\ a_1 & a_2 & \cdots & a_{n+1} \\ 1 & 1 & \cdots & 1 \end{vmatrix}$$

Aplicando la misma técnica, para obtener los elementos del segundo renglón como polinomios mónicos $P_{n-1}(a_{n+1})$ de grado $n-1$ que deseamos evaluar en los puntos a_1, a_2, \dots, a_{n+1} , es decir, por sumar múltiplos de los demás renglones, al segundo renglón se obtiene:

$$\Delta = \begin{vmatrix} P_n(a_1) & P_n(a_2) & \cdots & P_n(a_{n+1}) \\ P_{n-1}(a_1) & P_{n-1}(a_2) & \cdots & P_{n-1}(a_{n+1}) \\ \vdots & & & \\ 1 & 1 & \cdots & 1 \end{vmatrix}$$

En general, en el i -ésimo renglón son construidos polinomios mónicos de grado $n - i + 1$;

la dimensión de la matriz es $n + 1$

$$\Delta = \begin{vmatrix} P_n(a_1) & P_n(a_2) & \cdots & P_n(a_{n+1}) \\ P_{n-1}(a_1) & P_{n-1}(a_2) & \cdots & P_{n-1}(a_{n+1}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ P_2(a_1) & P_2(a_2) & \cdots & P_2(a_{n+1}) \\ P_1(a_1) & P_1(a_2) & \cdots & P_1(a_{n+1}) \\ P_0(a_1) & P_0(a_2) & \cdots & P_0(a_{n+1}) \end{vmatrix}$$

Escojamos el desarrollo siguiente:

$$\begin{aligned} P_n(\xi) &= (\xi - a_2) (\xi - a_3) \cdots (\xi - a_{n+1}) \\ P_{n-1}(\xi) &= (\xi - a_3) (\xi - a_4) \cdots (\xi - a_{n+1}) \\ &\cdots \\ P_2(\xi) &= (\xi - a_n) (\xi - a_{n+1}) \\ P_1(\xi) &= (\xi - a_{n+1}) \\ P_0(\xi) &= 1 \end{aligned}$$

En este caso resulta

$$\begin{aligned} P_n(a_2) &= P_n(a_3) = \cdots = P_n(a_{n+1}) = 0 \\ P_n(a_1) &= (a_1 - a_2)(a_1 - a_3) \cdots (a_1 - a_{n+1}) \\ P_{n-1}(a_3) &= P_{n-1}(a_4) = \cdots = P_{n-1}(a_{n+1}) = 0 \\ P_{n-1}(a_2) &= (a_2 - a_3)(a_2 - a_4) \cdots (a_2 - a_{n+1}) \end{aligned}$$

etc.

Por lo tanto el determinante toma finalmente la forma:

$$\Delta = \begin{vmatrix} P_n(a_1) & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ P_{n-1}(a_1) & P_{n-1}(a_2) & 0 & \cdots & 0 \\ P_{n-2}(a_1) & P_{n-2}(a_2) & P_{n-2}(a_3) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ & & & P_2(a_{n-1}) & 0 \\ & & & P_1(a_{n-1}) & P_1(a_n) & 0 \\ & & & 1 & 1 & 1 \end{vmatrix}$$

Por lo tanto, como queda un determinante triangular, éste no es otra cosa que el producto de su diagonal principal, o sea:

$$\begin{aligned} \Delta &= P_n(a_1) \cdot P_{n-1}(a_2) \cdot P_{n-2}(a_3) \cdots P_2(a_{n-1}) \cdot P_1(a_n) \cdot P_0(a_{n+1}) \\ &= \prod_{i=2}^n (a_1 - a_i) \prod_{i=3}^n (a_2 - a_i) \prod_{i=4}^n (a_3 - a_i) \cdots (a_{n-1} - a_n)(a_{n-1} - a_{n+1})(a_n - a_{n+1}) \cdot 1 \\ &= \prod_{\substack{i=1 \\ j>i}}^n (a_i - a_j) \end{aligned}$$

Que es el valor tradicional del determinante de Vandermonde.

Apéndice B

De las hipótesis de completamiento, introducida en la teoría se sigue un teorema conocido como “Teorema Spectral”, el cual nos dice que toda matriz arbitraria que tenga un conjunto completo de eigenvectores, se puede expresar como el producto de sus eigenvalores por los productos exteriores de sus eigenvectores, esto es:

$$T = \sum_{i=1}^n \mu_i |i\rangle\langle i|$$

Demostración:

Partiendo de la ecuación de eigenvalores para T , es decir:

$$T|i\rangle = \mu_i |i\rangle$$

multiplicando por la derecha por el eigenvector renglón $\langle i|$

$$\begin{aligned} T|i\rangle\langle i| &= \mu_i |i\rangle\langle i| \\ \sum_{i=1}^n T|i\rangle\langle i| &= \sum_{i=1}^n \mu_i |i\rangle\langle i| \\ A \sum_{i=1}^n |i\rangle\langle i| = AI &= \sum_{i=1}^n \mu_i |i\rangle\langle i| \quad \text{Q.E.D.} \end{aligned}$$

B' Otra fórmula importante, que es necesario demostrar, es la que aparece como producto exterior de los eigenvectores, en los teoremas de Espectación y de Sylvester que es un teorema de una validez más general, esto es:

$$\Gamma_i = |i\rangle\langle i| = \frac{\prod_{\mu_i \neq \mu_j} (T - \mu_j)I}{\prod_{i \neq j} (\mu_i - \mu_j)}$$

Una forma de calcular estos operadores idempotentes, es recordando que si T es una matriz que se puede diagonalizar, entonces es posible expresarla como:

$$u^{-1}T u = \Lambda \tag{B.1}$$

En donde u es una matriz cuyas columnas son los eigenvectores de la matriz T y Λ es una matriz diagonal, cuyos elementos son los eigenvalores de T .

Restemos μ_i en ambos miembros de B.1.

$$u^{-1}(T - \mu_i)u = (\Lambda - \mu_i)I \quad (\text{B.2})$$

Con objeto de poder visualizar bien esto calculamos los productos parciales.

$$\begin{aligned} (\Lambda - \mu_2)(\Lambda - \mu_3)(\Lambda - \mu_4) \cdots (\Lambda - \mu_n) &= \prod_{i \neq j}^n (\Lambda - \mu_j) = \\ & \begin{bmatrix} \mu_1 - \mu_2 & & & & & \\ & 0 & & & & \\ & & \mu_3 - \mu_2 & & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & \ddots & \\ & & & & & & 0 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \mu_1 - \mu_3 & & & & & \\ & \mu_2 - \mu_3 & & & & \\ & & 0 & & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & \ddots & \\ & & & & & & 0 \end{bmatrix} \times \\ & \begin{bmatrix} \mu_1 - \mu_4 & & & & & \\ & \mu_2 - \mu_4 & & & & \\ & & \mu_3 - \mu_4 & & & \\ & & & 0 & & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & \ddots & \\ & & & & & & 0 \end{bmatrix} \cdots \times \begin{bmatrix} \mu_1 - \mu_n & & & & & \\ & \mu_2 - \mu_n & & & & \\ & & \mu_3 - \mu_n & & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & \ddots & \\ & & & & & & 0 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} (\mu_1 - \mu_2) & (\mu_1 - \mu_3) & (\mu_1 - \mu_4) & \cdots & (\mu_1 - \mu_n) & & \\ & & & & & 0 & \\ & & & & & & \ddots & \\ & & & & & & & 0 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

O sea que nos resulta una matriz con un elemento distinto de cero, por lo tanto, el producto de matrices lo podemos expresar como:

$$\prod_{i \neq j}^n (\Lambda - \mu_j) = \prod_{j \neq 1}^n (\mu_1 - \mu_j) \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ & 0 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & 0 \end{bmatrix} = \prod_{j \neq 1}^n (\mu_1 - \mu_j) : 1 \rangle \langle 1 :$$

Por lo tanto este resultado se puede generalizar fácilmente en la forma:

$$\prod_{i \neq j}^n (\Lambda - \mu_j) = \prod_{i \neq j}^n (\mu_i - \mu_j) : 1 \rangle \langle 1 :$$

multiplicando esta ecuación por la izquierda por u y por la derecha por u^{-1} resulta:

$$\frac{\prod_{i \neq j}^n u(\Lambda - \mu_j)}{\prod_{i \neq j}^n (\mu_i - \mu_j)} u^{-1} = u : i \rangle \langle i : u^{-1} \quad (\text{B.3})$$

Por otra parte si multiplicamos la ecuación (B.2) por la izquierda y derecha respectivamente, resulta:

$$(T - \mu_i) = u(\Lambda - \mu_i)u^{-1} \quad (\text{B.4})$$

Analicemos el producto de u por el vector ordenado $|i\rangle$

$$u : |i\rangle = (|1\rangle |2\rangle \cdots |i\rangle \cdots |n\rangle) \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

Del cálculo de este producto vemos que, como u consta de columnas que son los eigenvectores, multiplicada por un vector, el cual tiene un “uno” en el lugar i -ésimo y “ceros” en los demás lugares, el resultado de este producto, selecciona precisamente la columna i -ésima de la matriz u , por lo tanto:

$$u : |i\rangle = |i\rangle \quad (\text{B.5})$$

y para el producto $\langle i : u^{-1}$ el razonamiento es similar, esto es:

$$\langle i : u^{-1} = \langle i| \quad (\text{B.6})$$

Sustituyendo B.4 a B.6 en B.3 resulta finalmente:

$$\frac{\prod_{i \neq j}^n (T - \mu_j)}{\prod_{i \neq j}^n (\mu_i - \mu_j)} = |i\rangle \langle i| = \Gamma_i \quad \text{Q.E.D}$$

Analizando esta fórmula vemos entre otras cosas, que cuando hay factores repetidos, es necesario omitir el eigenvalor que hace que los factores sean cero ya que si no lo hacemos $\Gamma_i = 0$, lo que implica que el producto exterior de los eigenvectores sería cero, por el momento consideramos eigenvalores distintos, y el producto de índices distintos nos da eigenvalores distintos.

Apéndice C

Demstración de que el espectro de eigenvalores para el interior de cualquier cadena y de una cadena con extremos fijos, toma la forma compacta.

$$\begin{vmatrix} f(m+2) & -g(m+2) - f(m+1) \\ f(m+1) & -g(m+1) - f(m) \end{vmatrix} = 0$$

La forma de los elementos de la matriz $t_{11}^{(n)}$, está dada por las ecuaciones (4.32), esto es:

$$\begin{aligned} q_{11} &= \frac{1}{\sinh\phi_1 \sinh\phi_2 (\cosh\phi_1 - \cosh\phi_2)} \left\{ \sinh(m+1)\phi_1 \cosh\phi_1 \sinh\phi_2 \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2} \sinh m\phi_1 \sinh\phi_2 - \sinh(m+1)\phi_2 \cosh\phi_2 \sinh\phi_1 + \frac{1}{2} \sinh m\phi_2 \sinh\phi_1 \right\} \\ q_{22} &= \frac{1}{\sinh\phi_1 \sinh\phi_2 (\cosh\phi_1 - \cosh\phi_2)} \left\{ -\sinh(m+1)\phi_1 \cosh\phi_2 \sinh\phi_2 \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2} \sinh m\phi_1 \sinh\phi_2 + \sinh(m+1)\phi_2 \cosh\phi_1 \sinh\phi_1 + \frac{1}{2} \sinh m\phi_2 \sinh\phi_1 \right\} \\ q_{21} &= \frac{1/2}{\sinh\phi_1 \sinh\phi_2 (\cosh\phi_1 - \cosh\phi_2)} \left\{ \sinh(m+1)\phi_1 \sinh\phi_2 \right. \\ &\quad \left. - \sinh(m+1)\phi_2 \sinh\phi_1 \right\} \\ q_{12} &= \frac{1}{\sinh\phi_1 \sinh\phi_2 (\cosh\phi_1 - \cosh\phi_2)} \left\{ \sinh(m+1)\phi_1 \left[-\frac{1}{2} - 2 \cosh\phi_1 \cosh\phi_2 \right] \sinh\phi_2 \right. \\ &\quad \left. - \sinh(m+1)\phi_2 \left[-\frac{1}{2} - 2 \cosh\phi_1 \cosh\phi_2 \right] \sinh\phi_1 + \sinh m\phi_1 \cosh\phi_2 \sinh\phi_2 \right. \\ &\quad \left. - \sinh m\phi_2 \sinh\phi_1 \cosh\phi_1 \right\} \end{aligned}$$

Escribiendo estos términos en forma de determinantes, ignorando por el momento los factores comunes $\sinh\phi_1 \sinh\phi_2 (\cosh\phi_1 - \cosh\phi_2)$ obtenemos que:

$$q'_{11} = \begin{vmatrix} \sinh(m+1)\phi_1 \cosh\phi_1 & \sinh(m+1)\phi_2 \cosh\phi_2 \\ \sinh\phi_1 & \sinh\phi_2 \end{vmatrix} - \frac{1}{2} \begin{vmatrix} \sinh m\phi_1 & \sinh m\phi_2 \\ \sinh\phi_1 & \sinh\phi_2 \end{vmatrix} \quad (\text{C.1})$$

$$q'_{22} = - \begin{vmatrix} \sinh(m+1)\phi_1 & \sinh(m+1)\phi_2 \\ \cosh\phi_1 \sinh\phi_1 & \cosh\phi_2 \sinh\phi_2 \end{vmatrix} - \frac{1}{2} \begin{vmatrix} \sinh m\phi_1 & \sinh m\phi_2 \\ \sinh\phi_1 & \sinh\phi_2 \end{vmatrix} \quad (\text{C.2})$$

$$q'_{21} = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} \sinh(m+1)\phi_1 & \sinh(m+1)\phi_2 \\ \sinh\phi_1 & \sinh\phi_2 \end{vmatrix} \quad (\text{C.3})$$

$$q'_{12} = \left[-\frac{1}{2} - 2 \cosh \phi_1 \cosh \phi_2 \right] \begin{vmatrix} \sinh(m+1)\phi_1 & \sinh(m+1)\phi_2 \\ \sinh\phi_1 & \sinh\phi_2 \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} \sinh m\phi_1 & \sinh m\phi_2 \\ \sinh\phi_1 \cosh \phi_1 & \sinh\phi_2 \cosh \phi_2 \end{vmatrix} \quad (\text{C.4})$$

Debido a la forma especial de T se cumple que:

$$q'_{ij}(m) = q'_{i+1,j}(m-1)$$

En particular

$$\begin{aligned} q'_{11}(m) &= q'_{21}(m-1) \\ q'_{22}(m-1) &= q'_{12}(m) \end{aligned} \quad (\text{C.5})$$

Que para uno $m = m+2$ la ecuaciones (C.5) son

$$\begin{aligned} q'_{11}(m+2) &= q'_{21}(m+1) \\ q'_{22}(m+1) &= q'_{12}(m+2) \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

Por ejemplo queremos comprobar la primera relación dada por (C.6), para lo cual es necesario calcular $\sinh(m+2)\phi_1$

$$\begin{aligned} \sinh(m+2)\phi_1 &= \sinh(m+1)\phi_1 \cosh \phi_1 + \cosh(m+1)\phi_1 \sinh \phi_1 \\ &= \{ \sinh(m+1)\phi_1 \cosh \phi_1 \} + \{ \cosh m\phi_1 \cosh \phi_1 + \sinh m\phi_1 \sinh \phi_1 \} \sinh \phi_1 \end{aligned}$$

Efectuando el producto en el último término, y tomando en cuenta que $\sinh^2 \phi_1 = \cosh^2 \phi_1 - 1$ resulta

$$\sinh(m+2)\phi_1 = \{ \sinh(m+1)\phi_1 \cosh \phi_1 \} + \{ \cosh m\phi_1 \cosh \phi_1 \sinh \phi_1 + \sinh m\phi_1 \cosh^2 \phi_1 - \sinh m\phi_1 \}$$

factorizando términos para introducir $\sinh(m+1)\phi_1$ tenemos que

$$\sinh(m+2)\phi_1 = 2[\sinh(m+1)\phi_1 \cosh \phi_1 - \frac{1}{2} \sinh m\phi_1] \quad (\text{C.7})$$

Despejando de esta última ecuación el $\sinh(m+1)\phi_1 \cosh \phi_1$ y sustituyéndolo en la ecuación $q'_{11}(m+1)$ dado por C.1 resulta

$$q'_{11} = \begin{vmatrix} \frac{1}{2} \sinh(m+2)\phi_1 + \frac{1}{2} \sinh m\phi_1 & \frac{1}{2} \sinh(m+2)\phi_2 + \frac{1}{2} \sinh m\phi_2 \\ \sinh\phi_1 & \sinh\phi_2 \end{vmatrix} - \frac{1}{2} \begin{vmatrix} \sinh m\phi_1 & \sinh m\phi_2 \\ \sinh\phi_1 & \sinh\phi_2 \end{vmatrix}$$

haciendo uso de la propiedad de los determinantes que nos permite separar el primer determinante de q'_{11} en dos partes, resulta un determinante exactamente igual, al del segundo término de q'_{11} por lo tanto queda finalmente que:

$$q'_{11}(m+2) = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} \sinh(m+2)\phi_1 & \sinh(m+2)\phi_2 \\ \sinh\phi_1 & \sinh\phi_2 \end{vmatrix} \quad (\text{C.8})$$

Si comparamos la ecuación (C.8) con (C.3) vemos que son iguales con la única diferencia de que sus argumentos son distintos esto es:

$$q'_{21}(m+1) = q'_{11}(m+2)$$

Con lo cual queda probada la validez de las ecuaciones (C.6). Además de que el cálculo anterior nos da alguna confianza adicional en el álgebra de la derivación, nos servirá para cálculos posteriores.

Definamos algunas funciones auxiliares:

$$f(k) = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} \sinh k \phi_1 & \sinh k \phi_2 \\ \sinh \phi_1 & \sinh \phi_2 \end{vmatrix} \quad (\text{C.9})$$

$$g(k) = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} \sinh k \phi_1 & \sinh k \phi_2 \\ \sinh 2\phi_1 & \sinh 2\phi_2 \end{vmatrix} \quad (\text{C.10})$$

Por lo tanto con estas definiciones:

$$\begin{aligned} q'_{11} &= f(m+2) & q'_{21} &= -g(m+2) - f(m+1) \\ q'_{21} &= f(m+1) & q'_{22} &= -g(m+1) - f(m) \end{aligned} \quad (\text{C.11})$$

En donde las q 's difieren de las q' 's por el denominador común $\sinh \phi_1 \sinh \phi_2 (\cosh \phi_1 - \cosh \phi_2)$ que es independiente de k y es cero únicamente bajo circunstancias excepcionales.

Por lo tanto, la condición para encontrar el espectro de eigenvalores dado por:

$$\begin{vmatrix} q_{11} & q_{12} \\ q_{21} & q_{22} \end{vmatrix}$$

queda finalmente como:

$$\begin{vmatrix} f(m+2) & -g(m+2) - f(m+1) \\ f(m+1) & -g(m+1) - f(m) \end{vmatrix} = 0 \quad \text{Q.E.D} \quad (\text{C.12})$$

o lo que es lo mismo usando la definición de factorización de un determinante que:

$$\begin{vmatrix} f(m+2) & g(m+2) \\ f(m+1) & g(m+1) \end{vmatrix} = - \begin{vmatrix} f(m+2) & f(m+1) \\ f(m+1) & f(m) \end{vmatrix}$$

Apéndice D

Demostración de que $f(m)$ y $g(m)$ definidos por (C.9) y (C.10) toman la forma en función de los polinomios de Tchebychev siguiente:

$$F(m) = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} u_m(z_+) & u_m(z_-) \\ u_{m-2}(z_+) & u_{m-2}(z_-) \end{vmatrix}$$

$$G(m) = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} u_{m+1}(z_+) & u_{m+1}(z_-) \\ u_{m-3}(z_+) & u_{m-3}(z_-) \end{vmatrix}$$

Consideremos

$$\frac{f(m)}{\sinh\phi_1 \sinh\phi_2} = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} \frac{\sinh m\phi_1}{\sinh\phi_1} & \frac{\sinh m\phi_2}{\sinh\phi_2} \\ \frac{\sinh\phi_1}{\sinh\phi_1} & \frac{\sinh\phi_2}{\sinh\phi_2} \end{vmatrix} = F(m)$$

$$F(m) = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} u_m(\phi_1) & u_m(\phi_2) \\ 1 & 1 \end{vmatrix}$$

donde $u_m(\cos\theta) = \frac{\sin(m+1)\theta}{\sin\theta}$.

Que es un polinomio de Tchebychev de segunda clase de argumento imaginario. Para la demostración es necesario el empleo de algunas identidades trigonométricas, estas son:

$$\begin{aligned} \sinh x + \sinh y &= 2 \sinh \frac{x+y}{2} \cosh \frac{x-y}{2} \\ \sinh x - \sinh y &= 2 \cosh \frac{x+y}{2} \sinh \frac{x-y}{2} \\ \cosh x + \cosh y &= 2 \cosh \frac{x+y}{2} \cosh \frac{x-y}{2} \\ \cosh x - \cosh y &= 2 \sinh \frac{x+y}{2} \sinh \frac{x-y}{2} \end{aligned} \tag{D.1}$$

$$f(m) = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} \sinh m\phi_1 & \sinh m\phi_2 \\ \sinh\phi_1 & \sinh\phi_2 \end{vmatrix} = \frac{1}{2} (\sinh m\phi_1 \sinh\phi_2 - \sinh m\phi_2 \sinh\phi_1)$$

sumando y restando una cantidad

$$2f(m) = \frac{1}{2} [\cosh(m\phi_1 - \phi_2) - \cosh(m\phi_1 - \phi_2)] - \frac{1}{2} [\cosh(m\phi_2 - \phi_1) - \cosh(m\phi_2 - \phi_1)]$$

ordenando términos

$$4f(m) = [\cosh(m\phi_1 + \phi_2) - \cosh(m\phi_2 + \phi_1)] - [\cosh(m\phi_1 - \phi_2) - \cosh(m\phi_2 + \phi_1)]$$

usando las ecuaciones (D.1) resulta

$$\begin{aligned} 4f(m) &= 2 \sinh\left(m \frac{\phi_1 + \phi_2}{2} + \frac{\phi_1 + \phi_2}{2}\right) \sin\left(m \frac{\phi_1 - \phi_2}{2} - \frac{\phi_1 - \phi_2}{2}\right) \\ &\quad - 2 \sinh\left(m \frac{\phi_1 + \phi_2}{2} - \frac{\phi_1 + \phi_2}{2}\right) \sin\left(m \frac{\phi_1 + \phi_2}{2} + \frac{\phi_1 - \phi_2}{2}\right) \\ 2f(m) &= \sinh(m+1) \frac{\phi_1 + \phi_2}{2} \sinh(m-1) \frac{\phi_1 - \phi_2}{2} \\ &\quad - \sinh(m-1) \frac{\phi_1 + \phi_2}{2} \sinh(m+1) \frac{\phi_1 - \phi_2}{2} \end{aligned}$$

Definamos

$$\begin{aligned} \phi_+ &= \frac{\phi_1 + \phi_2}{2} \\ \phi_- &= \frac{\phi_1 - \phi_2}{2} \end{aligned} \tag{D.2}$$

con lo cual $f(m)$ tomó la forma matricial siguiente

$$f(m) = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} \sin(m+1)\phi_+ & \sinh(m+1)\phi_- \\ \sin(m-1)\phi_+ & \sinh(m-1)\phi_- \end{vmatrix} \tag{D.3}$$

Procediendo a expresar $g(m)$ en esos mismos términos tenemos.

$$2g(m) = \sinh m \phi_1 \sinh 2\phi_2 - \sinh m \phi_2 \sinh 2\phi_1$$

que se puede poner en la forma siguiente

$$2g(m) = \frac{1}{2} [\cosh(m\phi_1 + 2\phi_2) - \cosh(m\phi_1 - 2\phi_2)] - \frac{1}{2} [\cosh(m\phi_2 + 2\phi_1) - \cosh(m\phi_2 - 2\phi_1)]$$

empleando las ecuaciones (D.1) resulta que

$$2g(m) = \sinh(m+2)\phi_+ \sinh(m-2)\phi_- - \sinh(m-2)\phi_+ \sinh(m+2)\phi_-$$

o finalmente

$$g(m) = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} \sinh(m+2)\phi_+ & \sinh(m+2)\phi_- \\ \sinh(m-2)\phi_+ & \sinh(m-2)\phi_- \end{vmatrix} \tag{D.4}$$

Como vemos (D.3) y (D.4) tienen la forma más simétrica, para los elementos de nuestro determinante.

Las ecuaciones (D.1) nos permiten el cálculo del denominador opcional, esto es.

$$\sinh \phi_1 \sinh \phi_2 (\cosh \phi_1 - \cosh \phi_2) = \frac{1}{2} [\cosh(\phi_1 + \phi_2) - \cosh(\phi_1 - \phi_2)] \times 2 \sinh \frac{\phi_1 + \phi_2}{2} \sinh \frac{\phi_1 - \phi_2}{2}$$

Empleando las definiciones (D.2) resulta.

$$\sinh \phi_1 \sinh \phi_2 (\cosh \phi_1 - \cosh \phi_2) = \sinh \phi_+ \sinh \phi_- (\cosh 2\phi_+ - \cosh 2\phi_-)$$

Por lo tanto tenemos finalmente que

$$\frac{f(m)}{\sinh\phi_+ \sinh\phi_-} = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} \frac{\sinh(m+1)\phi_+}{\sinh\phi_+} & \frac{\sinh(m+1)\phi_-}{\sinh\phi_-} \\ \frac{\sinh(m-1)\phi_+}{\sinh\phi_+} & \frac{\sinh(m-1)\phi_-}{\sinh\phi_-} \end{vmatrix}$$

$$F(m) = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} U_m(Z_+) & U_m(Z_-) \\ U_{m-2}(Z_+) & U_{m-2}(Z_-) \end{vmatrix} \quad (\text{D.5})$$

Usando la misma notación resulta:

$$\frac{g(m)}{\sinh\phi_+ \sinh\phi_-} \begin{vmatrix} \frac{\sinh(m+2)\phi_+}{\sinh\phi_+} & \frac{\sinh(m+2)\phi_-}{\sinh\phi_-} \\ \frac{\sinh(m-2)\phi_+}{\sinh\phi_+} & \frac{\sinh(m-2)\phi_-}{\sinh\phi_-} \end{vmatrix}$$

$$G(m) = \begin{vmatrix} U_{m+1}(Z_+) & U_{m+1}(Z_-) \\ U_{m-3}(Z_+) & U_{m-3}(Z_-) \end{vmatrix} \quad \text{Q.E.D} \quad (\text{D.6})$$

Es posible calcular algunos de los polinomios de subíndices pequeños, tenemos que

$$U_n(Z) = 2ZU_{n-1}(Z) - U_{n-2}(Z)$$

con

$$U_0(Z) = 1 \quad \text{por esto} \quad U_{-1}(Z) = 0$$

Por lo tanto los valores de algunos polinomios son:

$$\begin{aligned} U_{-1}(Z) &= 0 \\ U_0(Z) &= 1 \\ U_1(Z) &= 2Z \\ U_2(Z) &= 4Z^2 - 1 \\ U_3(Z) &= 8Z^3 - 4Z \\ U_4(Z) &= 16Z^4 - 12Z^2 + 1 \\ U_5(Z) &= 32Z^5 - 32Z^3 + 6Z \\ U_6(Z) &= 64Z^6 - 80Z^4 + 24Z^2 - 1 \end{aligned} \quad (\text{D.7})$$

De este modo tenemos, usando (D.5) y (D.6) junto con los polinomios anteriores.

$$\begin{aligned} F(1) &= \frac{1}{2} \begin{vmatrix} U_1(Z_+) & U_1(Z_-) \\ U_{-1}(Z_+) & U_{-1}(Z_-) \end{vmatrix} = 0 \\ F(2) &= \frac{1}{2} \begin{vmatrix} 4Z_+^2 - 1 & 4Z_-^2 - 1 \\ 1 & 1 \end{vmatrix} = 2(Z_+^2 - Z_-^2) \\ F(3) &= \frac{1}{2} \begin{vmatrix} 8Z_+^3 - 4Z_+ & 8Z_-^3 - 4Z_- \\ 2Z_+ & 2Z_- \end{vmatrix} = 8Z_+Z_-(Z_+^2 - Z_-^2) \\ F(4) &= \frac{1}{2} \begin{vmatrix} 16Z_+^4 - 12Z_+^2 + 1 & 16Z_-^4 - 12Z_-^2 + 1 \\ 4Z_+^2 - 1 & 4Z_-^2 - 1 \end{vmatrix} \\ &= 8(Z_+^2 - Z_-^2) \cdot (8Z_+^2 - Z_-^2 - 2(Z_+^2 + Z_-^2) + 1) \end{aligned}$$

Similarmente para las G 's

$$\begin{aligned}
G(1) &= 0 \\
G(2) &= 0 \\
G(3) &= 2(Z_+^2 - Z_-^2)\{4(Z_+^2 + Z_-^2) - 3\} \\
G(4) &= 32Z_+Z_-(Z_+^2 - Z_-^2)\{Z_+^2 - Z_-^2 - 1\}
\end{aligned}$$

finalmente utilizando la condición dada por (C.12) para encontrar el espectro de eigenvalores resulta, por ejemplo para $m = 2$

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{(\cosh 2\phi_+ - \cosh 2\phi_-)^2} \begin{vmatrix} F(4) & -G(4) - F(3) \\ F(3) & -G(3) - F(2) \end{vmatrix} = 0 \quad (D.8) \\
&= \frac{1}{(\cosh 2\phi_+ - \cosh 2\phi_-)^2}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\left| \begin{array}{cc} 8(Z_+^2 - Z_-^2)(8Z_+^2Z_-^2 - 2(Z_+^2 + Z_-^2) + 1) & -32Z_+Z_-(Z_+^2 - Z_-^2)\{Z_+^2 + Z_-^2 - 1\} - 8Z_+Z_-(Z_+^2 + Z_-^2) \\ 8Z_+Z_-(Z_+^2 + Z_-^2) & 2(Z_+^2 - Z_-^2)\{4(Z_+^2 + Z_-^2) - 3\} - 2(Z_+^2 - Z_-^2) \end{array} \right| = 0 \\
&= \frac{(Z_+^2 - Z_-^2)^2 8.2}{4(Z_+^2 - Z_-^2)} \begin{vmatrix} 8Z_+^2Z_-^2 - 2(Z_+^2 + Z_-^2) + 1 & -4Z_+Z_-\{4(Z_+^2 + Z_-^2) + 3\} \\ Z_+Z_- & 4(Z_+^2 + Z_-^2) - 4 \end{vmatrix} = 0 \quad (D.9)
\end{aligned}$$

En donde el denominador se obtiene, examinando cuidadosamente la definición de las U 's, esto es:

$$\begin{aligned}
U_m(\cos \theta) &= \frac{\text{sen}(m+1)\theta}{\text{sen}\theta} \quad \text{que también se define como} \\
t_m(\cos \theta) &= \cos m\theta
\end{aligned}$$

En nuestra notación $Z = \cos \theta$.

$$\begin{aligned}
\text{Calculemos} \quad \cosh 2\phi &= t_2(Z) \\
\text{Por lo tanto} &= \cosh^2 \phi + \sinh^2 \phi = 2 \cosh^2 \phi - 1 = 2Z^2 - 1 \\
\cosh 2\phi_+ - \cosh 2\phi_- &= (2Z_+^2 - 1) - (2Z_-^2 - 1) = 2(Z_+^2 - Z_-^2) \quad (D.10)
\end{aligned}$$

Además como Z tiene un rango de $-\infty$ a ∞ , entonces es conveniente examinar a $Z = \cos \theta$, en tres regiones características, esto es:

$$\begin{aligned}
\text{Región I} &\quad \text{para } |Z| \leq 1; \quad \theta = \arccos Z \\
\text{Región II} &\quad \text{para } Z \geq 1; \quad \theta = i \text{arcosh } Z \\
\text{Región III} &\quad \text{para } Z \leq -1; \quad \theta = i \text{arcosh}(|Z| + \pi)
\end{aligned}$$

En la región I, tenemos la definición estandar de los polinomios de Techebychev.

En la región II, tenemos

$$U_m(\cos \theta) = \frac{\text{sen}(m+1)\theta}{\text{sen}\theta} = \frac{i \text{senh}(m+1)\text{arcosh}Z}{i \text{senarcosh}Z} = \frac{\text{senh}(m+1)\phi}{\text{sen}\phi}$$

En la región III

$$U_m(\cos \theta) = \frac{\text{sen}(m+1)[i \text{arcosh} Z + \pi]}{\text{sen}[i \arccos Z + \pi]} = \frac{\text{sen}[(m+1)i \text{arcosh} Z + (m+1)\pi]}{\text{sen}[i \text{arcosh}(Z + \pi)]}$$

$$U_m(\cos \theta) = (-1)^{m+1} \frac{\text{senh}[(m+1)i\phi]}{\text{senh} i\phi} = (-1)^m \frac{\text{senh}(m+1)\phi}{\text{senh}\phi}$$

En donde $\phi = \text{arcosh}|Z|$.

Por lo tanto $(-1)^m$ restablece la paridad de $|Z|$ en la suma de polinomios.

Por otra parte, la forma simétrica para $F(m)$ y $G(m)$ encontradas anteriormente (ecs. (D.5) y (D.6)), no nos dan con claridad la forma de variación de los argumentos en los polinomios de Tchebychev, por lo tanto, es necesario encontrar una más adecuada, lo cual se logra por uso de $F(m)$ y $G(m)$ definidos anteriormente, esto es:

$$F(m) = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} U_m(Z_1) & U_m(Z_2) \\ 1 & 1 \end{vmatrix} \quad \text{donde} \quad U_0(Z) = 1$$

$$G(m) = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} U_m(Z_1) & U_m(Z_2) \\ U_1(Z_1) & U_1(Z_2) \end{vmatrix} \quad \text{donde} \quad U_1(Z) = 2Z$$

Con esto

$$F(m) = \frac{1}{2}[U_m(Z_1) - U_m(Z_2)]$$

$$G(m) = \frac{1}{2}[2Z_2U_m(Z_1) - Z_1U_m(Z_2)] \tag{D.11}$$

Por lo tanto de (C.11) junto con (D.8) y (D.9) tenemos

$$\frac{1}{4 \cdot 4(Z_1 - Z_2)^2} \begin{vmatrix} \frac{1}{2}[U_{m+2}(Z_1) - U_{m+2}(Z_2)] & -\frac{1}{2}[2Z_2U_{m+2}(Z_1) - Z_1U_{m+2}(Z_2)] - \frac{1}{2}[U_{m+1}(Z_1) - U_{m+1}(Z_2)] \\ \frac{1}{2}[U_{m+1}(Z_1) - U_{m+1}(Z_2)] & -\frac{1}{2}[2Z_2U_{m+1}(Z_1) - Z_1U_{m+1}(Z_2)] - \frac{1}{2}[U_m(Z_1) - U_m(Z_2)] \end{vmatrix}$$

Restando Z_2 veces la primera columna a la segunda, tenemos

$$\frac{1}{16(Z_1 - Z_2)^2} \begin{vmatrix} U_{m+2}(Z_1) - U_{m+2}(Z_2) & 2(Z_2U_{m+2}(Z_2) - Z_1U_{m+2}(Z_1)) + U_{m+1}(Z_1) - U_{m+1}(Z_2) \\ U_{m+1}(Z_1) - U_{m+1}(Z_2) & 2(Z_2U_{m+1}(Z_2) - Z_1U_{m+1}(Z_1)) + U_m(Z_1) - U_m(Z_2) \end{vmatrix}$$

Usando la relación de recursión $U_n = 2ZU_{n-1} - U_{n-2}$ y agrupando ligeramente, resulta finalmente que:

$$\frac{1}{16(Z_1 - Z_2)^2} \begin{vmatrix} U_{m+2}(Z_1) - U_{m+2}(Z_2) & U_{m+3}(Z_2) - U_{m+3}(Z_1) \\ U_{m+1}(Z_1) - U_{m+1}(Z_2) & U_{m+2}(Z_2) - U_{m+2}(Z_1) \end{vmatrix}$$

Apéndice E

Los eigenvalores que dan las frecuencias de los modos normales, para la vibración de una cadena, con interacciones a segundos vecinos y con ambos extremos fijos están determinados por los ceros de:

$$\frac{1}{16(Z_2 - Z_1)^2} \begin{vmatrix} U_{m+3}(Z_2) - U_{m+3}(Z_1) & U_{m+2}(Z_2) - U_{m+2}(Z_1) \\ U_{m+2}(Z_2) - U_{m+2}(Z_1) & U_{m+1}(Z_2) - U_{m+1}(Z_1) \end{vmatrix} = 0 \quad (\text{E.1})$$

Sin embargo, para simplificar el álgebra, transformamos más esta expresión. Es conveniente ignorar el denominador $16(Z_1 - Z_2)^2$, y llamar al determinante principal $D_m(Z_1, Z_2)$; además es claro que D_m es siempre divisible por $(Z_2 - Z_1)^2$, desde luego que sus elementos son diferencia de polinomios idénticos en Z_1 y Z_2 . Por lo tanto $\Sigma p_i Z_1^i - \Sigma p_i Z_2^i = \Sigma p_i (Z_1^i - Z_2^i)$ y una diferencia de sus i -ésimas potencias es siempre divisible por $(Z_2 - Z_1)$, (incluyendo $i = 0$), como cada una de las dos columnas producen tales factores, entonces el determinante como un todo es divisible por su cuadrado.

Entonces

$$D_m(Z_1, Z_2) = \begin{vmatrix} U_{m+3}(Z_2) & U_{m+2}(Z_2) \\ U_{m+2}(Z_2) & U_{m+1}(Z_2) \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} U_{m+3}(Z_1) & U_{m+2}(Z_1) \\ U_{m+2}(Z_1) & U_{m+1}(Z_1) \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} U_{m+3}(Z_1) & U_{m+2}(Z_2) \\ U_{m+2}(Z_1) & U_{m+1}(Z_2) \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} U_{m+3}(Z_2) & U_{m+2}(Z_1) \\ U_{m+2}(Z_2) & U_{m+1}(Z_1) \end{vmatrix}$$

Para reducir los determinantes de la primera línea empleamos las identidades

$$U_{m+3}(Z)U_{m+1}(Z) = \frac{1}{2(Z^2 - 1)}[T_{2m+6}(Z) - T_2(Z)]$$

$$U_{m+2}(Z)U_{m+2}(Z) = \frac{1}{2(Z^2 - 1)}[T_{2m+6}(Z) - T_0(Z)]$$

Restando estas dos indentidades resulta que

$$U_{m+3}(Z)U_{m+1}(Z) - U_{m+2}(Z)U_{m+2}(Z) = \frac{T_0(Z) - T_2(Z)}{2(Z^2 - 1)} = -1$$

ya que

$$T_0(Z) = 1$$

$$T_2(Z) = 2Z^2 - 1$$

Por lo tanto cada uno de los determinantes de la primera línea tiene el valor -1 entonces

$$D_m(Z_1, Z_2) = - \left[2 + \begin{vmatrix} U_{m+3}(Z_1) & U_{m+2}(Z_2) \\ U_{m+2}(Z_1) & U_{m+1}(Z_2) \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} U_{m+3}(Z_2) & U_{m+2}(Z_1) \\ U_{m+2}(Z_2) & U_{m+1}(Z_1) \end{vmatrix} \right] \quad (\text{E.2})$$

Usando la relación de recursión

$$U_{n+1}(Z) = 2ZU_n(Z) - U_{n-1}(Z) \quad (\text{E.3})$$

y aplicándola a los determinantes de $D_m(Z_1, Z_2)$ tenemos

$$\begin{aligned} \begin{vmatrix} U_{m+3}(Z_1) & U_{m+2}(Z_2) \\ U_{m+2}(Z_1) & U_{m+1}(Z_2) \end{vmatrix} &= \begin{vmatrix} 2Z_1U_{m+2}(Z_1) - U_{m+1}(Z_1) & U_{m+2}(Z_2) \\ 2Z_1U_{m+1}(Z_1) - U_m(Z_1) & U_{m+2}(Z_2) \end{vmatrix} \\ &= 2Z_1 \begin{vmatrix} U_{m+2}(Z_1) & U_{m+2}(Z_2) \\ U_{m+1}(Z_1) & U_{m+1}(Z_2) \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} U_{m+2}(Z_1) & U_{m+1}(Z_1) \\ U_{m+1}(Z_2) & U_m(Z_2) \end{vmatrix} \end{aligned} \quad (\text{E.4})$$

De la misma forma:

$$\begin{vmatrix} U_{m+3}(Z_2) & U_{m+2}(Z_1) \\ U_{m+2}(Z_2) & U_{m+1}(Z_1) \end{vmatrix} = 2Z_2 \begin{vmatrix} U_{m+2}(Z_2) & U_{m+2}(Z_1) \\ U_{m+1}(Z_2) & U_{m+1}(Z_1) \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} U_{m+2}(Z_1) & U_{m+1}(Z_2) \\ U_{m+1}(Z_1) & U_m(Z_2) \end{vmatrix} \quad (\text{E.5})$$

Sumando (E.4) y (E.5) y sustituyendo en (E.2) resulta:

$$\begin{aligned} D_m(Z_1, Z_2) &= - \left[2 + 2(Z_1 - Z_2) \begin{vmatrix} U_{m+2}(Z_1) & U_{m+2}(Z_2) \\ U_{m+1}(Z_1) & U_{m+1}(Z_2) \end{vmatrix} + \{-2 - D_{m-1}(Z_1, Z_2)\} \right] \\ D_m(Z_1, Z_2) &= D_{m-1}(Z_1, Z_2) - 2(Z_1, Z_2) \begin{vmatrix} U_{m+2}(Z_1) & U_{m+2}(Z_2) \\ U_{m+1}(Z_1) & U_{m+1}(Z_2) \end{vmatrix} \end{aligned} \quad (\text{E.6})$$

Que es una relación de recursión para D_m , pero es necesario evaluar explícitamente el determinante que ocurre en él, esto es:

$$\Delta_m = \begin{vmatrix} U_{m+2}(Z_1) & U_{m+2}(Z_2) \\ U_{m+1}(Z_1) & U_{m+1}(Z_2) \end{vmatrix}$$

Empleando (E.3) y factorizando el determinante resulta

$$\begin{aligned} \Delta_m &= 2U_{m+1}(Z_1)U_{m+1}(Z_2) \begin{vmatrix} Z_1 & Z_2 \\ 1 & 1 \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} U_{m+1}(Z_1) & U_{m+1}(Z_2) \\ U_m(Z_1) & U_m(Z_2) \end{vmatrix} \\ \Delta_m &= 2U_{m+1}(Z_1)U_{m+1}(Z_2)(Z_1 - Z_2) + \Delta_{m-1} \end{aligned} \quad (\text{E.7})$$

Puesto que $U_0 = 1$, $U_1 = 2Z$, $U_2 = 4Z^2 - 1$, resulta que las condiciones terminales de Δ_m son.

$$\begin{aligned} \Delta_{-1} &= 2(Z_1 - Z_2) \\ \Delta_0 &= 2U_1(Z_1)U_1(Z_2)(Z_1 - Z_2) + 2U_0(Z_1)U_0(Z_2)(Z_1 - Z_2) \\ \Delta_1 &= 2U_2(Z_1)U_2(Z_2)(Z_1 - Z_2) + \Delta_0 \\ &\dots \\ \Delta_m &= 2(Z_1 - Z_2) \sum_{k=0}^{m+1} U_k(Z_1)U_k(Z_2) \end{aligned} \quad (\text{E.8})$$

Donde Δ_m es conocida como fórmula de Christoffel-Darboux (ref. [16]). Por lo consiguiente podemos encontrar de (E.6) que

$$D_m = D_{m-1}(Z_1, Z_2) - 2(Z_1 - Z_2)\Delta_m$$

usando (E.8)

$$\begin{aligned} D_m &= D_{m-1} - 4(Z_1 - Z_2)^2 \sum_{k=0}^{m+1} U_k(Z_1)U_k(Z_2) \\ &= D_{m-2} - 4(Z_1 - Z_2)^2 \sum_{k=0}^m U_k(Z_1)U_k(Z_2) - 4(Z_1 - Z_2)^2 \sum_{k=0}^{m+1} U_k(Z_1)U_k(Z_2) \\ &\dots \\ D_m &= -4(Z_1 - Z_2)^2 \sum_{p=0}^{m+1} \sum_{k=0}^p U_k(Z_1)U_k(Z_2) \end{aligned}$$

ya que el término $D_{m-(m+1)}$ está incluido en $p = 0$ no se pone. El resultado de la doble suma es que $U_{m+1}(Z_1)U_{m+1}(Z_2)$ ocurre una vez, $U_m(Z_1)U_m(Z_2)$ ocurre dos veces, etc., y $U_0(Z_1)U_0(Z_2)$ ocurre $m + 2$ veces, por lo tanto

$$D_m = -4(Z_1 - Z_2)^2 \sum_{k=0}^{m+1} (m + 2 - k)U_k(Z_1)U_k(Z_2)$$

Como nosotros estamos interesados en $1/16(Z_2 - Z_1)^2 D_m$, entonces el polinomio característico está finalmente dado por:

$$x_m(Z_1, Z_2) = -\frac{1}{4} \sum_{k=0}^{m+1} (m + 2 - k)U_k(Z_1)U_k(Z_2)$$

Apéndice F

Obtención de la matriz de movimiento para la cadena diatómica. Para el caso de interacciones a segundos vecinos, las ecuaciones de movimiento están dadas por:

$$\begin{aligned}
 m_1 x_1 &= kx_2 + k'x_3 - 2x_1(k + k') \\
 m_2 x_2 &= kx_3 + kx_1 + k'x_4 - 2x_2(k + k') \\
 &\dots \\
 m_i x_i &= k'x_{i+2} + kx_{i+1} - 2x_i(k + k') + kx_{i-1} + k'x_{i-2} \\
 &\dots \\
 m_n x_n &= k'x_{n+2} + kx_{n+1} - 2x_n(k + k') + kx_{n-1} + k'x_{n-2}
 \end{aligned}$$

Que en forma compacta se reduce:

$$MX = KX \quad (\text{F.1})$$

En donde K es una matriz pentadiagonal de la forma

$$K = \begin{bmatrix}
 a_0 & a_1 & a_2 & & & & \\
 a_1 & a_0 & a_1 & a_2 & & & \\
 a_2 & a_1 & a_0 & a_1 & a_2 & & \\
 & a_2 & a_1 & a_0 & a_1 & a_2 & \\
 & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots
 \end{bmatrix}$$

Con:

$$a_1 = k; \quad a_2 = k' \quad \text{y} \quad a_0 = -2(a_1 + a_2)$$

Por otra parte como nos interesa que la matriz de movimiento para el caso de una cadena diatómica resulte simétrica, ya que en esta forma los cálculos numéricos se facilitan bastante, entonces para lograrlo es conveniente definir la transformación

$$Y = \sqrt{M}X \rightarrow Y = \sqrt{M}X \quad (\text{F.2})$$

multiplicando (F.1) por la izquierda por M^{-1} , resulta:

$$X = M^{-1}KX$$

multiplicando esta última ecuación por \sqrt{M} y por la identidad resulta finalmente

$$\sqrt{M}X = \sqrt{M}M^{-1}K\sqrt{M}^{-1}\sqrt{M}X$$

aplicando finalmente (F.2) resulta:

$$Y = \sqrt{M}^{-1} K \sqrt{M}^{-1} Y$$

En donde la matriz $\sqrt{M}^{-1} K \sqrt{M}^{-1}$ resulta ser completamente simétrica, esto es, supon-
gamos que \sqrt{M}^{-1} es una matriz diagonal de la forma

$$\sqrt{M}^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{M}} & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sqrt{1}\sqrt{M} & & & & \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{M}} & & & \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{M}} & & \\ \vdots & & & & \ddots & \\ 0 & & & & & \ddots \end{bmatrix}$$

Aplicándose a la matriz K por ambos lados resulta

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{M}} & & & & & \\ & \frac{1}{\sqrt{M}} & & & & \\ & & \frac{1}{\sqrt{M}} & & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & \ddots & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 & a_1 & a_2 & & & \\ a_1 & a_0 & a_1 & a_2 & & \\ a_2 & a_1 & a_0 & a_1 & a_2 & \\ & a_2 & a_1 & a_0 & a_1 & a_2 \\ \vdots & & & & & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{M}} & & & & & \\ & \frac{1}{\sqrt{M}} & & & & \\ & & \frac{1}{\sqrt{M}} & & & \\ & & & \frac{1}{\sqrt{M}} & & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & \ddots \end{bmatrix} =$$

$$= \begin{bmatrix} \frac{a_0}{m} & \frac{a_1}{\sqrt{mM}} & \frac{a_2}{m} & & \cdots & 0 \\ \frac{a_1}{\sqrt{mM}} & \frac{a_0}{\sqrt{M}} & \frac{a_1}{\sqrt{mM}} & \frac{a_2}{M} & & \\ \frac{a_2}{m} & \frac{a_1}{\sqrt{mM}} & \frac{a_0}{\sqrt{m}} & \frac{a_1}{\sqrt{mM}} & \frac{a_2}{m} & \\ \vdots & & & & & \vdots \\ 0 & & & & & 0 \end{bmatrix}$$

Que es finalmente la matriz de movimiento de una cadena lineal de masas alternantes con interacciones a segundos vecinos.

Apéndice G

```
// JOB
// FOR
*LIST ALL
*IOCS(2501 READER, 1403 PRINTER)
*IOCS(DISK)
*ONE WORD INTEGERS
*EXTENDED PRECISION
C
C   LA DESCRIPCION DE UNO DE LOS PROGRAMAS QUE SE EMPLEARON PARA
C   CALCULAR EL ESPECTRO DE FRECUENCIAS Y LOS MODOS NORMALES DE
C   VIBRACION ES LLAMADO PENTA
C   PENTA ES UN PROGRAMA PRINCIPAL QUE NOS CALCULA LOS EIGENVALORES
C   Y EIGENVECTORES DE UNA MATRIZ PENTADIAGONAL A LA CUAL SE LE
C   PUEDEN HACER MODIFICACIONES EN LAS ESQUINAS DE SUS DIAGONALES
C   INSTRUCCIONES DE ENTRADA QUE SIRVEN PARA DEFINIR ARREGLOS,
C   NOMBRES DE VARIABLES Y PARA DEFINIR ARREGLOS EN EL DISCO
C
DIMENSION Z(32)
COMMON   N,LI,LO,XO,XN
COMMON   D(30),C(30),B(30),A(30),E(30)
COMMON   Q(4,4),V(31)
DEFINE FILE 10(57,120,U,K1)
DEFINE FILE 101(41,96,U,K01)
DEFINE FILE 102(41,96,U,K02)
DEFINE FILE 103(41,96,U,K03)
DEFINE FILE 104(41,96,U,K04)
DEFINE FILE 105(41,96,U,K05)
DEFINE FILE 106(41,96,U,K06)
DEFINE FILE 107(41,96,U,K07)
DEFINE FILE 108(41,96,U,K08)
DEFINE FILE 109(41,96,U,K09)
DEFINE FILE 110(41,96,U,K10)
DEFINE FILE 111(41,96,U,K11)
DEFINE FILE 112(41,96,U,K12)
DEFINE FILE 113(41,96,U,K13)
DEFINE FILE 114(41,96,U,K14)
DEFINE FILE 115(41,96,U,K15)
DEFINE FILE 116(41,96,U,K16)
DEFINE FILE 117(41,96,U,K17)
DEFINE FILE 118(41,96,U,K18)
DEFINE FILE 119(41,96,U,K19)
DEFINE FILE 120(41,96,U,K20)
C
```

```

C   INSTRUCCIONES DE ENTRADA PARA LEER LA DIMENSION (N) DE LA MATRIZ
C   QUE DESEAMOS ANALIZAR
C
      LI = 8
      LO = 5
1   READ  (LI,20) N
20  FORMAT (I2)
      IF (N) 2,2,3
2   CALL  EXIT
3   WRITE (LO,300) N
300 FORMAT ('IN='I2)
C
C   GENERACION DE LOS ELEMENTOS MATRICIALES.- LLENAMOS LA MATRIZ
C   TENIENDO EN CUENTA SU FORMA PENTADIAGONAL (DIAGONALES A,B,C,D,E)
C   LO CUAL NOS PERMITE UTILIZAR MENOS MEMORIA DE LA MAQUINA, ESTA
C   PARTE ES LA QUE GENERALMENTE DIFIERE DE MODELO A MODELO
C
      X = -0.8
      X = 0.0
      X = 0.05
      DO 30 K=1,41
      X1 = X+1.0
      X2 = 1.0/X1
      X3 = 1.0-X2
      DO 10 J=1,N
      A(J) = X2
      B(J) = X3
      C(J) = -2*(X2+X3)
      D(J) = X3
10  E(J) = X2
C
C   PENII CALCULA LOS LIMITES DE GERSHORIN DE LOS EIGENVALORES Y
C   FORMA LOS COEFICIENTES USADOS EN LA RELACION DE RECURSION COMO
C   ELEMENTOS DE LAS MATRICES DE TRANSFERENCIA (T)
C
      CALL PENII
C
C   PENRO LOCALIZA LAS RAICES DE LA ECUACION CARACTERISTICA,
C   COLOCANDO A ELLAS EN UN CIERTO ARREGLO (V)
C
      CALL PENRO
C
C   PENGR IMPRIME ESTRELLAS QUE REPRESENTAN LOS VALORES NUMERICOS
C   DE LOS EIGENVALORES
C
      CALL PENGR (V,8.0)
C
C   CALCULO DE LOS EIGENVECTORES
C
      DO 12 I=1,N
C
C   PENEV CALCULA LAS COMPONENTES DEL I-ESIMO EIGENVECTOR, DEJANDO
C   LAS COMPONENTES EN EL ARREGLO Z
C
      CALL PENEV (Z,I)
C
C   PENNO NORMALIZA LAS PRIMERAS N COMPONENTES DEL VECTOR DE
C   ARGUMENTO      Z

```

```

CALL PENNO (Z,N)
C
C   PENST(Z,N,M,K,L) ALMACENA Y RECUPERA LOS VECTORES DE EL DISCO
C   DE ACUERDO CON LA OPCION L, EL ARGUMENTO ES UN VECTOR Z DE
C   DIMENSIONES N,K ES EL ARCHIVO DEL DISCO QUE SERA EMPLEADO Y M
C   ES EL NUMERO DE REGISTRO
C
12  CALL PENST (Z,N,100+I,K,3)
C
C   EN ESTA PARTE GRAFICAMOS LOS MODOS NORMALES DE VIBRACION LA
C   OPCION ES QUE PUEDEN SER GRAFICADOS CON ESTRELLAS Y UNIDOS
C   MANUALMENTE O GUARDADOS EN ALGUN REGISTRO PARA QUE DESPUES
C   SEAN UNIDOS AUTOMATICAMENTE
C
30  X = X + 0.05
    DO 32 I=1,N
C
C   PENPG(Z,N,M,K,L) HACE UNA PAGINA DE GRAFICAS DE LOS EIGENVEC-
C   TORES, Z ES EL VECTOR QUE CONTIENE LAS COMPONENTES (NORMALIZADAS)
C   DE EL EIGENVECTOR DE DIMENSION N, M ES LO QUE DESEAMOS SACAR, K
C   ES EL NUMERO DE ARCHIVO EN QUE LOS PUNTOS VAN A SER INTRODUCIDOS
C   Y L ES LA OPCION
C
    CALL PMPG (Z,N,0,10,1)
    CALL PENPG (Z,N,0,10,2)
    CALL PENST (Z,N,100+I,41,4)
    DO 31 K=1,41
    CALL PENST (Z,N,100+I,K,5)
31  CALL PENPG (Z,N,K,10,3)
32  CALL PENPG (V,N,I,10,5)
    GO TO 1
    END
//EJECT
// JOB
// FOR
*LIST ALL
*IOCS(2501 READER, 1403 PRINTER)
*IOCS(DISK)
*ONE WORD INTEGERS
*EXTENDED PRECISION
*NAME JOC
C   JOC ES EL PROGRAMA PRINCIPAL DE UN CONJUNTO DE PROGRAMAS, DESIGNADOS
C   PARA EVALUAR LOS EIGENVALORES Y EIGENVECTORES DE UNA MATRIZ PENTADIAGONAL
C
    COMMON N,LI,LO,XO,XN
    COMMON P(30,5)
    COMMON Q(4,4),V(31)
    WRITE (3,300)
300  FORMAT('1'20X' DIAGONALIZACION DE UNA MATRIZ PENTADIAGONAL '/
1    30X' 14 DE FEBRERO DE 1970 '/')
1    CALL PENRM
    CALL PENII
    CALL PENRO
    CALL PENWM
    WRITE (3,350)
350  FORMAT('1')
    GO TO 1
    END

```

```

// FOR
*LIST ALL
*ONE WORD INTEGERS
*EXTENDED PRECISION
C
  SUBROUTINE PENCPC
C    PENCPC IMPRIME EL VALOR DEL POLINOMIO CARACTERISTICO EN 100
C    PUNTOS ASI COMO LOS ELEMENTOS DEL MENOR QUE LO DEFINE Y LA FASE
C    DE SUS VECTORES COLUMNA
C
  COMMON      N,LI,L0,X0,XN
  COMMON      P(30,5)
  COMMON      Q(4,4),V(31)
  EQUIVALENTE (Q11,Q(1,1)),(Q12,Q(1,2)),(Q21,Q(2,1)),(Q22,Q(2,2))
  WRITE (3,300)
300  FORMAT('1 POLINOMIO CARACTERISTICO DE UNA MATRIZ PENTADIAOONAL'/)
  X = X0 - 0.5
  DX = (XN-X0+1.0)*100.0
  DO 2 I=1,100
  CALL PENQ(X,Y,N)
  P1 = ATAN(Q12/Q11)
  P2 = ATAN(Q22/Q21)
  WRITE (3,310) Q,Y,Q11,Q12,PI,Q21,Q22,P2
310  FORMAT ('0X='F8.3,3X,'Q(X)='E16.9,
  *          5X'Q11='F15.6', Q12='F16.6,10X,'PHI='F12.8/
  *          40X'Q21='F15.6', Q22='F15.6,10X,'PHI='F12.8)
  2   X = X+DX
  WRITE (3,350)
350  FORMAT ('1')
  RETURN
  END
C
// EJECT
// FOR
*LIST ALL
*ONE WORD INTEGERS
*EXTENDED PRECISION
C
  SUBROUTINE PENEV (Z,K)
C
C    PENEV(Z,K) CALCULA LAS COMPONENTES DEL K-ESIMO EIGENVECTOR, DEJANDO
C    LOS ELEMENTOS EN EL ARREGLO Z
C
  DIMENSION  S(32),T(34),Z(32)
  COMMON     N,LI,L0,X0,XN
  COMMON     A(30),B(30),C(30),D(30),B(30)
  COMMON     Q(4,4),V(31)
  EQUIVALENCE (S(1),T(3))
  EQUIVALENCE (Q11,Q(1,1)),(Q12,Q(1,2))
  CALL PENQK (V(K),Y,N)
  T(1) = 0.0
  T(2) = 0.0
  T(3) = Q11
  T(4) = -Q12
  DO 10 J=1,N
10  S(J+2)=A(J)*T(J+3)+(B(J)+V(K)*E(J))*T(J+2)+C(J)*T(J+1)+D(J)*T(J)
  N2 = N+2
  DO 30 I=1,N2

```

```

30  Z(I) = S(I)
    RETURN
    END

C
// EJECT
// FOR
*LIST ALL
*ONE WORD INTEGERS
*EXTENDED PRECISION
C
    SUBROUTINE PENGE (V)
C
C  PENGE(V) SE EMPLEA PARA SACAR LOS EIGENVECTORES DEL DISCO LOS UNIFICA
C  Y GRAFICA, POR LO REGULAR ES UNA PARTE DEL PROGRAMA PRINCIPAL, ESA ES
C  LA RAZON POR LA CUAL NO APARECE EN ALGUNOS DE ELLOS
C
    DIMENSION  V(1),Z(31)
    COMMON     N
    DO 32 I=1,N
    CALL PENPG (Z,N,0,10,1)
    CALL PENPG (Z,N,0,10,2)
    CALL PENST (Z,N,100+I,41,4)
    DO 31 K=1,41
    CALL PENST (Z,N,100+I,K,5)
31  CALL PENPG (Z,N,K,10,3)
32  CALL PENPG (V,N,I,10,5)
    RETURN
    END

C
// EJECT
// FOR
*LIST ALL
*ONE WORD INTEGERS
*EXTENDED PRECISION
C
    SUBROUTINE PENG (A1,A2,L)
C
C  PENG (A1,A2,L) SIMULA LA ENTRADA DE TARJETAS DE DATOS PARA UNA
C  MATRIZ PENTADIAGONAL CON LA PRIMERA DIAGONAL EXTERNA IGUAL A A1 Y LA
C  SEGUNDA EXTERNA IGUAL A A2, EXCEPTO PARA LAS OPCIONES L=1,2,3,4 LAS
C  TERMINACIONES SON
C  L=1 AMBOS EXTREMOS FIJOS
C  L=2 EXTREMO IZQUIERDO FIJO, DERECHO LIBRE
C  L=3 EXTREMO IZQUIERDO LIBRE, DERECHO FIJO
C  L=4 AMBOS EXTREMOS LIBRES
C
    DIMENSION  A(30),B(30),C(30),D(30),E(30)
    COMMON     N,LI,LO,XO,XN
    COMMON     P(30,5)
    EQUIVALENCE (A(1),P(1,4)),(B(1),P(1,3)),(C(1),P(1,2))
    EQUIVALENCE (D(1),P(1,1)),(E(1),P(1,5))
    DO 1 I=1,N
    A(I) = A2
    B(I) = A1
    C(I) = -2.0*(A1+A2)
    D(I) = A1
    E(I) = A2
1  CONTINUE

```

```

        GOTO (10,20,30,40) ,L
10     RETURN
20     C(N-1) = C(N-1)+A2
        C(N)   = C(N)+A1+A2
        RETURN
30     C(1) = C(1)+A2+A1
        C(2) = C(2) +A2
        RETURN
40     C(1) = C(1)+A1+A2
        C(N) = C(1)
        C(2) = C(2)+A2
        C(N-1)=C(2)
        RETURN
        END

C
// EJECT
// FOR
*LIST ALL
*ONE WORD INTEGERS
*EXTENDED PRECISION
C
        SUBROUTINE PENGR (Z,W)
C
C     PENGR IMPRIME ESTRELLAS QUE REPRESENTAN LOS VALORES NUMERICOS DE LOS
C     EIGENVALORES Y ADEMAS COLOCA UNA 'O' EN EL PUNTO DONDE SE INTERSECTAN
C     DOS CURVAS
C
        DIMENSION Z(1),III(120)
        COMMON      N,LI,LO
        S=100.0/W
        DO 11 I=1,120
11     III (I)=16448
        DO 12 I=1,101,10
12     III(I)=-14016
        DO 27 I=1,N
        L=IFIX(-Z(I)*S)+1
        IF(L) 27,27,21
21     IF (L-120) 22,22,27
22     IF (III(L)-23616) 23,24,23
23     III(L) = 23616
        GO TO 27
24     III(L)=20544
27     CONTINUE
        WRITE (LO.300) III
300    FORMAT (1X,120A1)
        RETURN
        END

C
// EJECT
// FOR
*LIST ALL
*ONE WORD INTEGERS
*EXTENDED PRECISION
C
        SUBROUTINE PENII
C
C     PENII CALCULA LOS LIMITES DE GERSHGORIN DE LOS EIGENVALORES Y
C     FORMA LOS COEFICIENTES USADOS EN LAS RELACIONES DE RECURSION COMO

```

```

C      ELEMENTOS DE LAS Q'S
C
      DIMENSION  A(30),B(30),C(30),D(30),E(30)
      COMMON     N,L,I,L0,X0,XN
      COMMON     P(30,5)
      EQUIVALENCE (A(1),P(1,4)),(B(1),P(1,3)),(C(1),P(1,2))
      EQUIVALENCE (D(1),P(1,1)),(E(1),P(1,5))
C
C      ESTABLECE LOS LIMITES DE GERSHGORIN PARA LOS EIGENVALORES
C
      R=ABS(D(1))+ABS(E(1))
      X0=C(1)-R
      XN=C(1)+B
      R =ABS(B(2))+ABS(D(2))+ABS(E(2))
      X0=PENMI(C(2)-R,X0)
      XN=PENMA(C(2)+R,XN)
      N2=N-2
      DO 4 I=3,N2
      R =ABS(A(I))+ABS(B(I))+ABS(D(I))+ABS(E(I))
      X0=PENMI(C(I)-R,X0)
4      XN=PENMA(C(I)+R,XN)
      R =ABS(A(N-1))+ABS(B(N-1))+ABS(D(N-1))
      X0=PENMI(C(N-1)-R,X0)
      XN=PENMA(C(N-1)+R,XN)
      R =ABS(A(N))+ABS(B(N))
      X0=PENMI(C(N)-R,X0)
      XN=PENMA(C(N)+R,XN)
C
C      FORMAMOS LOS COEFICIENTES QUE SERAN USADOS EN LAS RELACIONES DE
C      RECURSION
C
      DO 20 I=1,N
      R = 1.0/E(I)
      DO 16 J=1,4
16      P(I,J)=-R*P(I,J)
20      E(I)=R
      RETURN
      END
C
// EJECT
// FOR
*LIST ALL
*ONE WORD INTEGERS
*EXTENDED PRECISION
C
      FUNCTION PENMA(X,Y)
C
C      PENMA(X,Y) SELECCIONA EL MAXIMO DE X Y Y
C
      IF (X-Y) 1,2,2
1      PENMA=Y
      RETURN
2      PENMA=X
      RETURN
      END
C
// EJECT
// FOR

```



```

*LIST ALL
*ONE WORD INTEGERS
*EXTENDED PRECISION
C
      FUNCTION    PENMI(X,Y)
C
C      PENMI(X,Y) SELECCIONA EL MINIMO DE X Y Y
C
      IF (X-Y) 1,1,2
1      PENMI=X
      RETURN
2      PENMI=Y
      RETURN
      END
C
// EJECT
// FOR
*LIST ALL
*ONE WORD INTEGERS
*EXTENDED PRECISION
C
      SUBROUTINE  PENNO (Z,N)
C
C      PENNO(Z,N) NORMALIZA LAS PRIMERAS COMPONENTES DE EL VECTOR DE
C      ARGUMENTO Z
C
      DIMENSION  Z(1)
      A = 0.0
      DO 5 I=1,N
5      A = A+Z(I)**2
      A = 1.0/SQRT(A)
      DO 7 I=1,N
7      Z(I)=A*Z(I)
      RETURN
      END
C
// EJECT
// FOR
*LIST ALL
*ONE WORD INTEGERS
*EXTENDED PRECISION
C
      SUBROUTINE  PENPG (Z,N,M,K,L)
C
C      PENPG(Z,N,M,K,L) HACE UNA PAGINA DE GRAFICAS DE LOS EIGENVECTORES,
C      Z ES EL VECTOR QUE CONTIENE LAS COMPONENTES (NORMALIZADAS) DEL
C      EIGENVECTOR DE DIMENSION N, M ES EL QUE DESEAMOS SACAR, K ES EL
C      NUMERO DE ARCHIVO EN EL QUE LOS PUNTOS VAN A SER INTRODUCIDOS Y
C      L ES LA OPCION DESEADA
C      L=1 GENERA UNA PAGINA EN BLANCO
C      L=2 INVIERTE LAS COMPONENTES DEL EIGENVECTOR
C      L=3 IMPRIME LA PAGINA TERMINADA
C
      DIMENSION  Z(1),JJJ(120)
      COMMON     NN,LI,LO
      GOTO (10,20,30,40,50) ,L
10     CONTINUE
      DO 11 I=1,120

```

```

11   JJJ(I)=16448
      DO 12 I=1,57
12   WRITE (K'I) JJJ
      RETURN
20   CONTINUE
      DO 22 J=1,41
      READ  (K'50-J) JJJ
      DO 21 I=1,N
      JJ=7*I+J
21   JJJ(JJ)=19264
22   WRITE (K'50-J) JJJ
      RETURN
30   CONTINUE
      DO 31 I=1,N
31   CALL PENPL (7*I+M,50 -(IFIX(10.0*Z(I))+M),K,23616)
      RETURN
40   CONTINUE
      WRITE(K'M) (Z(J),J=1,N)
      RETURN
C
C   CUANDO L=5 LOS PARAMETROS SON USADOS COMO SIGUE:
C   Z ES EL VECTOR EIGENVALOR
C   M LA COMPONENTE DEL VECTOR FRECUENCIA QUE SERA USADO
C   K EL ARCHIVO QUE SERA IMPRIMIDO
C
353  FORMAT(' MODO NORMAL NUMERO',I5.5X,'EIGENVALOR',F15.6/)
50   CONTINUE
      WRITE (L0,352)
      WRITE (L0,353) M,Z(M)
      WRITE (L0,350)
      DO 51 I=1,57
      READ  (K'I) JJJ
      WRITE (L0,351) JJJ
51   CONTINUE
      WRITE (L0,350)
      RETURN
350  FORMAT (1X,12('P E N T A '))
351  FORMAT (1X,120A1)
352  FORMAT (1H1)
353  FORMAT(' MODO NORMAL NUMERO',I5.5X,'EIGENVALOR',F15.6/)
      END
C
// EJECT
// FOR
*LIST ALL
*ONE WORD INTEGERS
*EXTENDED PRECISION
C
      SUBROUTINE PENPL (IA,IB,K,ICH)
C
C   PENPL(IA,IB,K,ICH) INTRODUCE EL CARACTER ICH EN EL ARCHIVO DEL
C   DISCO K CON LA COLUMNA IA DEL NUMERO DE REGISTRO IB
C
      DIMENSION III(120)
      IF (IA) 1,1,2
1     IA=1
2     IF (120-IA) 3,3,4
3     IA=120

```

```

4     IF (IB) 5,5,6
5     IB=1
6     IF (57-IB) 7,8,8
7     IB=57
8     READ (K'IB) III
      III(IA)=ICH
      WRITE (K'IB) III
      RETURN
      END

C
// EJECT
// FOR
*LIST ALL
*ONE WORD INTEGERS
*EXTENDED PRECISION
C
      SUBROUTINE PENQK (X,Y,K)

C
C     PENQK(X,Y,K) FORMA EL PRODUCTO DE LAS PRIMERAS K DE LAS Q-MATRICES
C     EVALUANDO EL PRODUCTO RECURSIVAMENTE CON EL EIGENVALOR X, Y DEPOSITA
C     EL VALOR DEL MENOR SUPERIOR IZQUIERDO 2X2 DE EL PRODUCTO EN Y. SOLAMEN-
C     TE LAS PRIMERAS DOS COLUMNAS DE Q SON EVALUADAS ASI COMO SOLAMENTE
C     ELLAS ENTRAN DENTRO DE LA EVALUACION DEL POLINOMIO CARACTERISTICO
C
      COMMON      N,LI,LO,XO,XN
      COMMON      A(30),B(30),C(30),D(30),E(30)
      COMMON      Q(4,4),V(31)
      EQUIVALENCE (Q11,Q(1,1)),(Q12,Q(1,2)),(Q21,Q(2,1)),(Q22,Q(2,2))
      EQUIVALENCE (Q31,Q(3,1)),(Q32,Q(3,2)),(Q41,Q(4,1)),(Q42,Q(4,2))
      IF (K-1) 1,2,3
1     Y = 1.0
      RETURN
2     Y=B(1)+X*E(1)
      RETURN
3     Q11=A(1)
      Q12=B(1)+X*E(1)
      Q21=1.0
      Q22=0.0
      Q31=0.0
      Q32=1.0
      Q41=0.0
      Q42=0.0
      W1=Q11
      W2=Q12
      DO 20 J=2,K
      W1=(B(J)+X*E(J))*Q21+C(J)*Q31+D(J)*Q41
      W2=(B(J)+X*E(J))*Q22+C(J)*Q32+D(J)*Q42
      Q41=Q31
      Q42=Q32
      Q31=Q21
      Q32=Q22
      Q21=Q11
      Q22=Q12
      Q11=W1+A(J)*Q11
      Q12=W2+A(J)*Q12
20    CONTINUE
      Y=W1*Q22-W2*Q21
      RETURN

```

```

      END
C
// EJECT
// FOR
*LIST ALL
*ONE WORD INTEGERS
*EXTENDED PRECISION
C
      SUBROUTINE PENRM
C
C      PENRM LEE LAS TARJETAS DE ACUERDO CON LOS ELEMENTOS PENTADIAGONALES
C      DE LA MATRIZ Y FORMA LAS FILAS DE ARRIBA DE LAS Q- MATRICES, N Y
C      EPSILON SON ESPECIFICADOS EN LA PRIMERA TARJETA
C
      COMMON  N,LI,LO,XO,XN
      COMMON  D(30),C(30),B(30),A(30),E(30)
      READ (LI,200) N
200  FORMAT (I2)
      IF (N) 1,1,2
      1  RETURN
      2  WRITE (LO,300) N
300  FORMAT (' N= ',I2/)
      WRITE (LO,301)
301  FORMAT('O MATRIZ PENTADIAGONAL QUE SERA DIAGONALIZADA')
      DO 3 I=1,N
      READ (LI,210) A(I),B(I),C(I),D(I),E(I)
210  FORMAT (5F10.0)
      WRITE (LO,310) A(I),B(I),C(I),D(I),E(I)
310  FORMAT (1X,5F15.6)
      3  CONTINUE
      RETURN
      END
C
// EJECT
// FOR
*LIST ALL
*ONE WORD INTEGERS
*EXTENDED PRECISION
C
      SUBROUTINE PENRO
C
C      PENRO LOCALIZA LAS RAICES DE LA ECUACION CARACTERISTICA, COLOCANDO
C      A ELLAS EN EL ARREGLO V
C
      DIMENSION  J(2),R(2),S(2),T(31),U(32)
      COMMON  N,LI,LO,XO,XN
      COMMON  A(30),B(30),C(30),D(30),E(30)
      COMMON  Q(4,4),V(31)
      EQUIVALENCE (Q11,Q(1,1)),(Q12,Q(1,2)),(Q21,Q(2,1)),(Q22,Q(2,2))
      EQUIVALENCE (J1,J(1)),(J2,J(2)),(R1,R(1)),(R2,R(2))
      EQUIVALENCE (S1,S(1)),(S2,S(2))
      SIZ(X) = ABS(X)-EPS
      WID(X,Y) = ABS(Y- X)- DEL
      QM(X1,X2,X3,Y1,Y2,Y3)=(0.5*(Y1*(X2-X3)*(X2+X3)+Y2*(X3-X1)*(X3+X1)
*      +Y3*(X1-X2)*(X1+X2)))/(Y1*(X2-X3)+Y2*(X3-X1)
*      +Y3*(X1-X2))
      RS(X,Y) = SIGN(1.0,X)-SIGN(1.0,Y)
      PHI = 0.15

```

```

TAU = 1.0E-2
DEL = (1.0E-5*ABS(XN-X0))/N
U(1) = X0-DEL
C
C   PRODUCIMOS LA PRIMERA RAIZ CUYO VALOR ES EL ELEMENTO A11 DE LA MATRIZ
C
V(1) = -B(1)/E(1)
C
C   LOS INTERVALOS CERRADOS QUE CONTIENEN LAS RAICES SON DETERMINADOS
C   RECURSIVAMENTE
C
DO 500 K=2,N
C
C   LOS CEROS DE LOS POLINOMIOS ANTERIORES DETERMINAN INTERVALOS PARA
C   ESTE CICLO, ASI COMO EL ESTABLECIMIENTO DEL FACTOR DE ESCALA QUE
C   SERA EMPLEADO
C
CALL PENQK (U(1),T(1),K)
DO 1 I=2,K
U(I) = V(I-1)
1 CALL PENQK (U(I),T(I),K)
U(K+1) = XN
CALL PENQK (U(K+1),T(K+1),K)
U(N+2) = XN+DEL
C
C   UNA RAIZ TIENE QUE SERA LOCALIZADA PARA CADA K INTERVALO
C
DO 400 I=1,K
X1 = U(I)
Y1 = T(I)
X2 = U(I+1)
Y2 = T(I+1)
X3 = U(I+2)
IF (RS(Y1,Y2)) 50,5,50
C
C   SI EL INTERVALO ES EXTREMADAMENTE PEQUENO, SUPONDREMOS QUE LA RAIZ
C   QUE ESTA CONTENIDA SE ENCUENTRA EN SU PUNTO MEDIO
C
5 IF (WID(X1,X2)) 6,6,7
6 V(I) = 0.5*(X1+X2)
GO TO 400
7 R1 = X2-PHI*(X2-X1)
R2 = X2+PHI*(X3-X2)
DO 25 M=1,3
DO 15 L=1,2
CALL PENQK (R(L),S(L),K)
IF (RS(Y1, S(L))) 12,15,12
12 U(I+1) = R(L)
T(I+1) = S(L)
X2 = R(L)
Y2 = S(L)
GO TO 40
15 CONTINUE
X = QM(R1,X2,R2,S1,Y2,S2)
CALL PENQK (X,Y,K)
IF (X1-X) 16,16,23
16 IF (X-X3) 17,17,23
17 IF (RS(Y1,Y)) 19,20,19

```

```

19  U(I+1) = X
    T(I+1) = Y
    X2 = X
    Y2 = Y
    GO TO 40
20  X2 = X
    Y2 = Y
22  R1 = 0.5*(R1+X)
    R2 = 0.5*(X+R2)
    GO TO 25
23  X = X2
    GO TO 22
25  CONTINUE
30  V(I) = X-TAU*(X-X1)
    V(I+1)= X+TAU*(X3-X)
    I = I+1
    GO TO 400
40  IF (U(I+1)-U(I+2)) 50,50,41
41  U(I+2) = U(I+1)
    T(I+2) = T(I+1)
    GO TO 50

C
C *****
C *       RUTINA QUE LOCALIZA RAICES       *
C *****
C
50  A1 = (X1+X1+X2)/3.0
    A2 = (X1+X2+X2)/3.0
    CALL PENQK (A1,Z1,K)
    CALL PENQK (A2,Z2,K)
    EPS = 0.5E-6*(ABS(Z1)+ABS(Z2))

C
C EMPLEANDO EL METODO DE LA "REGLA FALSA" SE ENCUENTRA NORMALMENTE QUE
C EL VALOR DE LA FUNCION EN UN PUNTO EXTREMO ES MUCHO MENOR QUE EN EL
C OTRO CUAMDO ES PEQUENO EL PUNTO EXTREMO PUEDE SER TOMADO COMO UNA
C RAIZ CUANDO LA RAZON DE LOS VALORES EXTREMOS ES MENOR QUE LA PRECISION
C DE LA COMPUTADORA, LA NUEVA APROXIMACION SERA NO CONFIABLE Y EL
C PUNTO EXTREMO MAYOR TIENE QUE SER MOVIDO.

    DO 200 M=1,30
    X = 0.5*(X1+X2)
    CALL PENQK (X,Y,K)
    IF (RS(Y,Y1)) 106,105,106
105  X1 = X
    Y1 = Y
    GO TO 107
106  X2 = X
    Y2 = Y
107  IF (WID(X1,X2)) 108,108,110
108  V(I) = 0.5*(X1+X2)
    GO TO 400
110  IF (ABS(Y1/Y2+Y2/Y1)-2.0E4) 125,200,200
125  S1 = X1
    S2 = X2

C
C DOS CICLOS DE LA REGLA FALSA SE LLEVAN A CABO, AUNQUE NO ES LOGICA-
C MENTE NECESARIO VERIFICAR QUE LA NUEVA ESTIMACION SE ENCUENTRE DENTRO
C DEL INTERVALO DE RAIZ, LA PERDIDA DE PRECISION PUEDE ALGUNAS VECES

```

```

C      ARROJAR LA INTER-SECCION FUERA.
C
      DO 135 L=1,2
      R(L) = (X1*Y2-X2*Y1)/(Y2-Y1)
      IF (X1-R(L)) 129,200,200
129    IF (R(L)-X2) 130,200,200
130    CALL PENQK (R(L),Y,K)
      IF (SIZ(Y)) 131,131,132
131    V(I)=R(L)
      GO TO 400
132    IF (RS(Y,Y1)) 134,133,134
133    XI = R(L)
      Y1 = Y
      J(L) = -1
      GO TO 135
134    X2 = R(L)
      Y2 = Y
      J(L) = 1
135    CONTINUE
C
C      EL PROCESO DE AITKEN DEL CUADRADO DE LA DELTA PROPORCIONA LAS ULTIMAS
C      DOS APROXIMACIONES TRASLADADAS EN EL MISMO PUNTO EXTREMO Y PROPORCIONA
C      LA NUEVA ESTIMACION LOCALIZADA DENTRO DEL INTERVALO
C
      IF (J1+J2) 141,200,142
141    R0 = S1
      GO TO 150
142    R0 = S2
150    X = (R0*R2-R1*R1)/(R0-R1-R1+R2)
      IF (X1-X) 151,200,200
151    IF (X-X2) 152,200,200
152    CALL PEMQK (X,Y,K)
      IF (SIZ(Y)) 153,153,154
153    V(I) = X
      GO TO 400
154    IF (RS(Y,Y1)) 156,155,156
155    X1 = X
      Y1 = Y
      GO TO 200
156    X2 = X
      Y2 = Y
      GO TO 200
200    CONTINUE
400    CONTINUE
500    CONTINUE
      RETURN
      END
C
// JOB
// FOR
*LIST ALL
*ONE WORD INTEGERS
*EXTENDED PRECISION
C
      SUBROUTINE PENST (Z,N,K,M,L)
C
C      PENST(Z,N,K,M,L) ALMACENA Y RECUPERA LOS VECTORES DEL DISCO DE
C      ACUERDO CON LA OPCION L, EL ARGUMENTO ES UN VECTOR Z DE DIMENSION

```

```

C      N, K ES EL ARCHIVO DE EL DISCO QUE SERA EMPLEADO Y M ES EL NUMERO
C      DE REGISTRO
C      L=1
C      L=2
C      L=3 ALMACENA EL VECTOR EN EL DISCO
C      L=4 REVISIA TODOS LOS VECTORES PARA LA MAYOR CONTINUIDAD POSIBLE
C      L=5 BUSCA EL VECTOR DEL DISCO
C
      DIMENSION X(32),Y(32),Z(32)
      GOTO (10,20,30,40,50) ,L
10     CONTINUE
      RETURN
20     CONTINUE
      RETURN
30     CONTINUE
      WRITE (K'M) (Z(I),I=1,N)
      RETURN
40     CONTINUE
      READ  (K'l) (X(I),I=1,N)
      DO 46 J=2,M
      READ  (K'J) (Y(I),I=1,N)
      A = 0.0
      B = 0.0
      DO 41 I=1,N
      A = A+(Y(I)-X(I))**2/((I+1)*(N-I+1) )
      B = B+(Y(I)+X(I))**2/((I+1)*(N-I+1))
41     CONTINUE
      IF (A-B) 44,44,42
42     DO 43 I=1,N
43     Y(I) = -Y(I)
44     DO 45 I=1,N
45     X(I) = Y(I)
46     WRITE (K'J) (Y(I),I=1,N)
      RETURN
50     CONTINUE
      READ  (K'M) (Z(I),I=1,N)
      RETURN
      END
C
// JOB
// FOR
*LIST ALL
*IOCS(2501 READER, 1403 PRINTER)
*IOCS(DISK)
*ONE WORD INTEGERS
*EXTENDED PRECISION
C
      SUBROUTINE PENW1 (XI,Y,L)
C
C      PENW1(XI,Y,RHO,L) GRAFICA LOS PUNTOS EN EL PLANO XI-Y COMO FUNCIONES
C      DE LOS DOS COSENOS DE LOS NUMEROS DE ONDA, VARIAS OPCIONES EXISTEN DE
C      ACUERDO CON LA OPCION L
C      L=1 LIMPIA LA IMAGEN DE LA PAGINA E INSERTA LA FRONTERA C=1
C      L=2 INSERTA EL PUNTO DE ACUERDO CON LA REL. DE DISPERSION MONOATOMICA
C      L=3 INSERTA EL PUNTO DE ACUERDO CON LA REL. DE DISPERSION DIATOMICA
C      L=4 IMPRIME LA PAGINA COMPLETA
C
      DIMENSION III(120)

```



```

COMMON      N,LI,LO,XO,XN
IX(X)      =92+IFIX(26.0*X)
IY(Y)      =18-IFIX(15.0*Y)
GO TO (10,20.40),L
10 DO 12 I=1,120
12 III(I) = 16448
DO 14 I=1,57
14 WRITE (20'I) III
CALL PENPL (IX( 0.0),IY( 0.0),20,19264)
CALL PENPL (IX( 1.0),IY( 1.0),20,19264)
CALL PENPL (IX( 1.0),IY(-1.0),20,19264)
CALL PENPL (IX(-1.0),IY( 1.0),20,19264)
CALL PENPL (IX(-1.0),IY(-1.0),20,19264)
RETURN
C
C LOS ARGUMENTOS PARA PENGW DEL MODELO MONOATOMICO SON
C XI = -LAMBDA/(4.0*(A1+A2))
C Y = A1/(4.0*A2)
C RHO=1.0
C
20 B = Y+1.0
AC = XI*(1.0+4.0*Y)
IF (B*B-AC) 22,23,24
22 CONTINUE
SQ = SQRT(AC-B*B)
C1 = -Y+SQ
C2 = -Y-SQ
CALL PENPL (IX(C1),IY(C2),20,23616)
RETURN
23 CALL PENPL (IX(B),IY(B),20,23616)
RETURN
24 CONTINUE
SQ = SQRT(B*B-AC)
C1 = -Y+SQ
C2 = -Y-SQ
CALL PENPL (IX(C2),IY(C1),20,23616)
RETURN
40 WRITE (L0,3010)
DO 42 I=1,57
READ (20'I) III
WRITE (L0,3000) III
42 CONTINUE
RETURN
3000 FORMAT (1X,120A1)
3010 FORMAT ('1')
END
C
// EJECT
// FOR
*LIST ALL
*ONE WORD INTEGERS
*EXTENDED PRECISION
C
SUBROUTINE PENW2 (XI, Y, RHO, L)
C
C PENW2(XI,Y,RHO,L) GRAFICA LOS PUNTOS EN EL PLANO XI-Y COMO
C FUNCIONES DE LOS DOS COSENO DE LOS NUMEROS DE ONDA, VARIAS OPCIONES
C EXISTEN DE ACUERDO CON LA OPCION L

```

```

C      L=1 LIMPIA LA IMAGEN DE LA PAGINA E INSERTA LA FRONTERA C=1
C      L=2 INSERTA EL PUNTO DE ACUERDO CON LA REL. DE DISPERSION MONOATOMICA
C      L=3 INSERTA EL PUNTO DE ACUERDO CON LA REL. DE DISPERSION DIATOMICA
C      L=4 IMPRIME LA PAGINA COMPLETA

      DIMENSION   III(120)
      COMMON      N,LI,LO,XO,XN
      IX(X)   =   92+IFIX(26.0*X)
      IY(Y)   =   40-IFIX(15.0*X)
      GO TO (10,30,40),L
10     DO 12 I=1,120
12     III(I) = 16448
      DO 14 I=1,57
14     WRITE (20'I) III
      CALL PENPL (IX( 0.0),IY( 0.0),20,19264)
      CALL PENPL (IX( 1.0),IY( 1.0),20,19264)
      CALL PENPL (IX( 1.0),IY(-1.0),20,19264)
      CALL PENPL (IX(-1.0),IY( 1.0),20,19264)
      CALL PENPL (IX(-1.0),IY(-1.0),20,19264)
      RETURN

C
C      LOS ARGUMENTOS PARA PENGW DEL MODELO DIATOMICA SON
C      XI = LAMBDA/A2
C      Y  = A1/A2
C      RHO= M PEQUENA/ M GRANDE
C
30     CRHO = SQRT(RHO)
      CRHO = CRHO+1.0/CRHO
      B    = CRHO*XI+(Y+2.0)**2
      AC   = 4.0*(XI*XI+2.0*CRHO*XI*(Y+1)+2.0*((Y+2.0)**2-2.0))
      IF (B*B-AC) 32,33,34
32     SQ = SQRT(AC-B*B)
      C1  = 0.25*(B+SQ)
      C2  = 0.25*(B-SQ)
      CALL PENPL (IX(C1),IY((C2),20,23616)
      RETURN
33     CALL PENPL (IX(B),IY(B),20,23616)
      RETURN
34     SQ = SQRT(B*B)-AC)
      C1  = 0.25*(B+SQ)
      C2  = 0.25*(B-SQ)
      CALL PENPL (IX(C2),IY(C1),20,23616)
      RETURN
40     WRITE (LO,3010)
      DO 42 I=1,57
      READ  (20'I)   III
      WRITE (LO,3000) III
42     CONTINUE
      RETURN
3000    FORMAT (1X,120A1)
3010    FORMAT ('1')
      END

C
// EJECT
// FOR
*LIST ALL
*ONE WORD INTEGERS
*EXTENDED PRECISION

```

```

C
SUBROUTINE PENWM
C
C PENWM ES UNA SUBROUTINA QUE ESCRIBE LOS VALORES DE LOS EIGENVALORES Y
C SUS EIGENVECTORES ASOCIADOS
C
DIMENSION Z(32)
COMMON N,LI,LO,XO,XN
COMMON P(30,5)
COMMON Q(4,4),V(31)
WRITE (LO,300)
300 FORMAT ('1')
DO 30 I=1,N
CALL PENEV (Z,I)
R1 = Z(N+1)/Z(1)
R2 = Z(N+2)/Z(1)
CALL PENNO (Z,N)
WRITE (LO,310) I,V(I),(Z(J),J=1,N)
310 FORMAT('0 EIGENVECTOR NO.',I2,10X,'EIGENVALOR'
1 ,F10.6/(1X,10F12.6))
WRITE (LO,320) R1,R2
310 FORMAT (' CHECA COMPONENTES QOE RESULTARAN CERO ',10X,2E12.4)
30 CONTINUE
RETURN
END

```

Referencias

- [1] L. Brillouin, "WAVE PROPAGATION IN PERIODIC STRUCTURES," McGraw Hill, New York (1946), reprinted Dover (1953).
- [2] A. A. Maradudin, E. W. Montrol and G. H. Weiss, "THEORY OF LATTICE DYNAMICS IN THE HARMONIC APPROXIMATION," Academic Press, New York (1963).
- [3] PROGRESS OF THEORETICAL PHYSICS, Supplement No. 36, "CONTRIBUTION TO THE THEORY OF LINEAR CHAIN," Kyoto (1966).
- [4] PROGRESS OF THEORETICAL PHYSICS, Supplement No. 23, "LATTICE VIBRATION OF IMPERFECT CRYSTALS," Kyoto (1962).
- [5] J. Hori, "SPECTRAL PROPERTIES OF DISORDERED CHAINS AND LATTICES," Pergamon Press, London (1968).
- [6] Denos C. Gazis and Richard Wallis, "SURFACE VIBRATIONAL MODES IN CRYSTAL LATTICES WITH COMPLEX INTERATOMIC INTERACTIONS," Journal of Mathematical Physics, 3, 190-199 (1969).
- [7] Hirosugo Matsuda, "THE TRANSFER METHOD IN THE THEORY OF NORMAL VIBRATIONS OF CHAIN MOLECULES," Supplement Progress of Theoretical Physics, No. 23, 24-58 (1962).
- [8] P. A. M. Dirac, "THE PRINCIPLES OF QUANTUM MECHANICS," at Clarendon Press (1958).
- [9] Paul R. Halmos, "FINITE DIMENSIONAL VECTOR SPACES," D. Van Nostrand Inc. 2nd. Edition (1960).
- [10] F. R. Gantmacher, "THE THEORY OF MATRICES," Chelsea Publishing Inc. New York, N. Y. (1960).
- [11] Charles Kittel, "INTRODUCTION TO SOLID STATE PHYSICS," John Wiley, New York, London Sydney, 3rd. Edition, Chapter 5, (1966).
- [12] J. H. Wilkinson, "THE ALGEBRAIC EIGENVALUE PROBLEM," Clarendon Press, Oxford (1965).
- [13] Harold V. McIntosh y otros "SOLUCION MATRICIAL DE SISTEMAS DE ECUACIONES DIFERENCIALES LINEALES," Instituto Mexicano del Petroleo, México (1970).

- [14] Gerardo Cisneros S. "A FORTRAN CODED REGULAR EXPRESSION COMPILER FOR THE IBM 1130, COMPUTING SYSTEM," Acta Mexicana de Ciencia y Tecnología, I, (1970).
- [15] J. Flores and P. A. Melo, "THE RAYLEIGH-RITZ METHOD: A GRAPHICAL PROOF," American Journal Of Physics 37, 619-620 (1969).
- [16] A. Erdelyi, W. Magnus, F. Oberhettinger, and F. G. Tricomi (Editors), "HIGHER TRANSCEDENTAL FUNCTIONS," (Bateman manuscript project) McGraw-Hill New York, Chapter X, (1953).