



**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL  
ESTADO DE MORELOS**

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS

INSTITUTO DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y APLICADAS

CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS

**PROBLEMA DE STURM-LIOUVILLE MATRICIAL EN EL ESTUDIO DE  
DIVERSAS EXCITACIONES ELEMENTALES EN SISTEMAS A CAPAS**

TESIS

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE

**DOCTOR EN CIENCIAS**

PRESENTA:

**RENÉ PERNAS SALOMÓN**

Director de la Tesis:

**Dr.Sc. ROLANDO PÉREZ ÁLVAREZ.**

Centro de Investigación en Ciencias.

Instituto de Investigación en Ciencias Básicas y Aplicadas

UAEM.

Cuernavaca, Morelos.

junio 2015

A mis hijos: Darío y Sofía.

# Índice

<b>Jurado de tesis</b>	<b>6</b>
<b>Agradecimientos</b>	<b>7</b>
<b>Publicaciones del autor relacionadas con la tesis</b>	<b>8</b>
<b>Resumen</b>	<b>10</b>
<b>Abstract</b>	<b>11</b>
<b>Abreviaturas</b>	<b>12</b>
<b>1 Antecedentes y objetivos de la tesis</b>	<b>13</b>
1.1 Introducción general . . . . .	13
1.2 Excitaciones elementales que originan problemas de Sturm-Liouville Matriciales . . . . .	14
1.3 Ubicuidad del problema Sturm-Liouville matricial . . . . .	16
1.4 Visión general de la función de Green . . . . .	18
1.5 Visión general de las matrices de transferencia . . . . .	19
1.6 Problema $\Omega - d$ . . . . .	20
1.7 Objetivos de la tesis . . . . .	22
1.7.1 Objetivos relativos a la función de Green . . . . .	22
1.7.2 Objetivos relativos al método de la matriz de transferencia . . . . .	22
<b>2 Función de Green del medio homogéneo</b>	<b>24</b>
2.1 Introducción . . . . .	24
2.2 Soluciones LI. Problema Cuadrático de Eigenvalores y sus propiedades . . . . .	25
2.3 Forma general y compacta de la función de Green del operador Sturm-Liouville matricial homogéneo con condiciones de regularidad en el infinito . . . . .	28
2.3.1 Caso $\mathbf{P} + \mathbf{Y} = \mathbf{0}$ . . . . .	29
2.3.2 Caso $\mathbf{P} + \mathbf{Y} \neq \mathbf{0}$ . . . . .	30
2.3.3 Expresión para verificar la validez de las funciones $\mathbf{G}(z, z')$ . . . . .	31
2.4 Funciones $\mathbf{G}(z, z')$ de casos particulares de interés . . . . .	32

2.4.1	Problemas con $N = 1$ . . . . .	33
2.4.2	Problemas con $N = 2$ . . . . .	35
2.4.3	Problemas con $N = 3$ . . . . .	37
2.4.4	Problemas con $N = 5$ . . . . .	42
2.4.5	Aproximación de la función envolvente (EFA)- $N$ . . . . .	44
2.4.6	Pseudopotenciales locales- $N$ . . . . .	47
2.5	Función $\mathbf{G}(z, z')$ en un medio con pérdidas . . . . .	49
2.5.1	Modos electromagnéticos en un medio isotrópico conductor . . . . .	49
2.5.2	Modos elásticos en un medio viscoso. Cristal isotrópico . . . . .	50
<b>3</b>	<b>Matrices de transferencia y sus relaciones</b> . . . . .	<b>52</b>
3.1	Definiciones y propiedades básicas . . . . .	52
3.1.1	Matriz de transferencia completa ( $\mathbf{M}$ ) . . . . .	52
3.1.2	Matriz de transferencia asociada ( $\mathbf{T}$ ) . . . . .	53
3.1.3	Matrices de transferencia de coeficientes ( $\mathbf{K}$ ) . . . . .	54
3.1.4	Matrices de dispersión ( $\mathbf{S}$ ) . . . . .	56
3.1.5	Matriz de rigidez $\mathbf{E}$ , matriz de admitancia $\mathbf{L}_c$ y la matriz híbrida $\mathbf{H}$ . . . . .	56
3.2	Relaciones entre las distintas matrices y análisis de la estabilidad numérica . . . . .	58
3.2.1	Relación entre las matrices $\mathbf{M}$ - $\mathbf{T}$ . Estabilidad numérica de $\mathbf{M}$ . . . . .	58
3.2.2	Relación entre las matrices $\mathbf{K}$ - $\mathbf{T}$ . Estabilidad numérica de $\mathbf{K}$ . . . . .	58
3.2.3	Relación entre las matrices $\mathbf{H}$ y $\mathbf{T}$ . Estabilidad numérica de $\mathbf{H}$ . . . . .	58
3.2.4	Relación entre las matrices $\mathbf{E}$ y $\mathbf{T}$ . Estabilidad numérica de $\mathbf{E}$ . . . . .	59
3.2.5	Relación entre las matrices $\mathbf{S}$ y $\mathbf{H}$ . Estabilidad numérica de $\mathbf{S}$ . . . . .	60
3.2.6	Estabilidad numérica de las matrices inversas: $\mathbf{T}^{-1}$ , $\mathbf{L}_c$ , $\mathbf{H}^{-1}$ . . . . .	61
3.3	Reglas de composición de matrices . . . . .	62
3.3.1	Regla de composición de la matriz $\mathbf{H}$ . . . . .	62
3.3.2	Regla de composición de la matriz $\mathbf{E}$ . . . . .	63
3.3.3	Regla de composición de la matriz $\mathbf{S}$ . . . . .	63
3.3.4	Regla de composición de las $\mathbf{M}$ , $\mathbf{T}$ y $\mathbf{K}$ . . . . .	64
<b>4</b>	<b>Formulación general de problemas de contorno típicos en términos de matrices numéricamente estables</b> . . . . .	<b>65</b>
4.1	Sistemas de pozos y barreras . . . . .	65
4.1.1	Sistema de barreras finitas . . . . .	65
4.1.2	Problema de escape . . . . .	67
4.2	Sistema periódico . . . . .	68
4.2.1	Formulación en términos de $\mathbf{H}$ . . . . .	68
4.2.2	Formulación en términos de $\mathbf{E}$ . . . . .	69

Índice	3
4.2.3 Formulación en términos de $\mathbf{S}$	69
<b>5 Solución de problemas prácticos en distintos sistemas a capas</b>	<b>72</b>
5.1 Sistemas piezoeléctricos multicapas: Curvas de dispersión de velocidades superficiales de ondas SH	72
5.1.1 Introducción	72
5.1.2 Ecuación Sturm-Liouville matricial	73
5.1.3 Condiciones de contorno	74
5.1.4 Cálculo de curvas de dispersión de velocidades superficiales de ondas SH en términos de la matriz $\mathbf{T}$ ( $4 \times 4$ )	75
5.1.5 Cálculo de curvas de dispersión de velocidades superficiales de ondas SH en términos de la matriz híbrida $\mathbf{H}$ ( $4 \times 4$ )	76
5.1.6 Resultados de los cálculos numéricos	77
5.2 Cristales fonónicos unidimensionales: Determinación de bandas prohibidas de ondas elásticas	82
5.2.1 Introducción	82
5.2.2 Ecuación Sturm-Liouville matricial	83
5.2.3 Condiciones de contorno	87
5.2.4 Cálculo de la transmitancia en términos de la matrix de transferencia asociada $\mathbf{T}$ ( $4 \times 4$ )	87
5.2.5 Cálculo de la transmitancia en términos de la matrix híbrida $\mathbf{H}$ ( $4 \times 4$ )	89
5.2.6 Cálculo de la transmitancia en términos de una matrix de dispersión $\mathbf{S}$ ( $4 \times 4$ )	90
5.2.7 Resultado de los cálculos numéricos	91
5.3 Cristales fotónicos de Silicio poroso: Dispersión de ondas electromagnéticas	96
5.3.1 Introducción	96
5.3.2 Ecuación Sturm-Liouville Matricial. Propagación de OEM en sistemas anisotrópicos lineales multicapas	97
5.3.3 Propagación de OEM en sistemas isotrópicos lineales multicapas	99
5.4 Microcavidad Fabry-Pérot	100
5.4.1 Condiciones de contorno	101
5.4.2 Cálculo de reflectancia en términos de la matriz $\mathbf{T}$ ( $2 \times 2$ )	101
5.4.3 Cálculo de reflectancia en términos de la matriz $\mathbf{H}$ ( $2 \times 2$ )	102
5.4.4 Resultado de cálculos numéricos	103
5.5 Espejo fotónico de Silicio poroso	105
5.5.1 Resultado de cálculos numéricos	105
5.6 Superredes en doble capa de grafeno: Tunelaje de electrones	106
5.6.1 Introducción	106
5.6.2 Ecuación Sturm-Liouville matricial	108
5.6.3 Condiciones de contorno	111
5.6.4 Cálculo de la transmitancia en términos de la matriz $\mathbf{K}$ ( $4 \times 4$ )	111

5.6.5	Cálculo de la transmitancia en términos de la matriz $\mathbf{H}$ ( $4 \times 4$ ) . . . . .	112
5.6.6	Cálculo de la transmitancia en términos de la matriz $\mathbf{S}$ ( $4 \times 4$ ) . . . . .	114
5.6.7	Resultado de los cálculos numéricos . . . . .	115
<b>6</b>	<b>Conclusiones y recomendaciones</b>	<b>122</b>
6.1	Conclusiones . . . . .	122
6.2	Recomendaciones y Problemas abiertos . . . . .	125
	<b>Apéndices</b>	<b>126</b>
<b>A</b>	<b>Obtención de la forma general y compacta de la función de Green</b>	<b>126</b>
<b>B</b>	<b>Modelo Fenomenológico Completo (MFC). Ecuación de movimiento</b>	<b>128</b>
<b>C</b>	<b>Ecuación de la onda elástica en un cristal ortotrópico</b>	<b>131</b>
<b>D</b>	<b>Ecuaciones de movimiento en un medio piezoeléctrico</b>	<b>133</b>
<b>E</b>	<b>Modos magneto-electro-elásticos. Ecuación de movimiento</b>	<b>136</b>
<b>F</b>	<b>Propiedades físicas efectivas (Material magneto-electro-elástico)</b>	<b>138</b>
<b>G</b>	<b>Procedimiento para determinar las matrices de transferencia</b>	<b>139</b>
<b>H</b>	<b>Matriz de transferencia asociada en términos del espesor de una capa de material homogéneo</b>	<b>140</b>
<b>I</b>	<b>Matriz de rigidez en términos del espesor de una capa de material homogéneo</b>	<b>142</b>
<b>J</b>	<b>Relación entre las matrices <math>\mathbf{S}</math> y <math>\mathbf{H}</math></b>	<b>143</b>
<b>K</b>	<b>Transformación de la ecuación de movimiento de la onda TH piezoeléctrica a la forma Sturm-Liouville Matricial</b>	<b>145</b>
<b>L</b>	<b>Tensor de rigidez</b>	<b>147</b>
<b>M</b>	<b>Ecuación de la onda elástica en un cristal isotrópico</b>	<b>148</b>
<b>N</b>	<b>Cálculo del factor de Localización (FL)</b>	<b>150</b>
<b>O</b>	<b>Campo magnético en sistemas anisotrópicos lineales multicapas</b>	<b>152</b>
<b>P</b>	<b>Forma lineal asociada al operador <math>\mathbf{L}</math> en doble capa de grafeno</b>	<b>153</b>
<b>Q</b>	<b>Determinante de la matriz <math>\mathbf{K}</math> en doble capa de Grafeno</b>	<b>154</b>

<i>Índice</i>	5
<b>Notación</b>	<b>156</b>
<b>Lista de tablas</b>	<b>157</b>
<b>Lista de figuras</b>	<b>158</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>161</b>

# Jurado de tesis

1. Presidente: Dr. Rafael Baquero Parra. / Departamento de Física, CINVESTAV.
2. Secretario: Dr. Luis Manuel Gaggero Sager. / Instituto de Investigación en Ciencias Básicas y Aplicadas-UAEM.
3. Vocal: Dr. Guillermo Monsivais Galindo. / Instituto de Física-UNAM.
4. Vocal: Dr. José A. Otero Hernández. / Departamento de Física y Matemáticas. Instituto tecnológico de Estudios Superiores de Monterrey (ITESM), campus Estado de México.
5. Vocal: Dra. Gabriela Guadalupe Hinojosa Palafox. / Instituto de Investigación en Ciencias Básicas y Aplicadas-UAEM.
6. Suplente: Dr. Rolando Pérez Álvarez. / Instituto de Investigación en Ciencias Básicas y Aplicadas-UAEM.
7. Suplente: Dr. Isaac Rodríguez Vargas. / Unidad Académica de Física-UAZ.



# Agradecimientos

Agradezco sinceramente al Dr.C. Rolando Pérez Álvarez por la excelente oportunidad de realizar mi doctorado en ciencias bajo su dirección. Le agradezco su acertada guía, su confianza y sus invaluable enseñanzas en los campos de la física y las matemáticas.

Muchas gracias a mi Comité tutorial por el seguimiento y apoyo a este trabajo de tesis:

1. Dr. Jesús Arriaga Rodríguez,
2. Dr. Miguel Eduardo Mora Ramos,
3. Dr. María del Rocío Nava Lara.

Un agradecimiento especial para la Dra. Julia Tagüeña Parga, quien fuera inicialmente miembro de mi Comité tutorial hasta diciembre de 2013. Por el tiempo dedicado a la revisión de esta tesis y por su valiosa colaboración en todo momento.

Extiendo mi agradecimiento a los integrantes del jurado revisor de la tesis, por aceptar esta responsabilidad y por sus acertadas recomendaciones.

Al Centro de Investigación en Ciencias de la UAEM, antes Facultad de Ciencias, por aceptarme como estudiante en su programa de posgrado.

Quisiera reconocer el indispensable apoyo brindado por el Estado Mexicano a través del Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) consistente en una beca para la realización de este doctorado desde el 06 de agosto de 2012 hasta el 05 de agosto de 2015, No. becario/CVU: 275580/441523. Mi agradecimiento también por el financiamiento (PNPC-2014) para estancias de investigación en otras universidades del territorio nacional con beneficios sustanciales para mi preparación y el desarrollo de los temas de trabajo que se exponen en esta tesis.

Mi agradecimiento para Marcos Huerta, Roberto Tellez, Miller (mi hermano), Aldo, Javier de la Rosa, Hugo porque fueron y serán los amigos en este generoso país. A Marcos muchas gracias por su ayuda en el mantenimiento de mis equipos de cómputo.

En lo personal, a Alina, mi esposa, quien tiene el mérito de haberme apoyado en esta meta desde mucho antes de iniciar el doctorado. A mi familia.

Sinceramente,  
René Pernas Salomón.

# Publicaciones del autor relacionadas con la tesis

## Publicaciones en revistas indexadas

- R. Pernas-Salomón and R. Pérez-Álvarez, *Sturm-Liouville matrix equation for the study of electromagnetic waves propagation in layered anisotropic media*, Progress In Electromagnetics Research M (PIER M), Vol. 40, pp. 79-90, (2014). ISSN de la revista PIER M: 1937-8726.
- Pérez-Álvarez, R. and Pernas-Salomón, R. and Velasco, V. R., *Relations between transfer matrices and numerical stability analysis to avoid the  $\Omega d$  problem*, SIAM Journal on Applied Mathematics (SIAP), Vol 75 (4), pp. 1403-1423, (2015).
- R. Pernas-Salomón and R. Pérez-Álvarez and Velasco, V. R., *General form of the Green's function regular at infinity for the homogeneous Sturm-Liouville matrix operator*, Aceptado para publicar en Applied Mathematics and Computation, Elsevier Editorial System. Ref. No.: AMC-D-15-01590. (2015)

Trabajos enviados a publicar:

- R. Pernas-Salomón and R. Pérez-Álvarez and Z. Lazcano-Ortiz and J. Arriaga-Rodríguez, *The scattering matrix approach to study elastic waves propagation in one-dimensional disordered phononic crystals*, enviado a publicar en Journal of Applied Physics. Manuscript No. JR15-4838.

## Publicaciones en memorias de congresos

1. 2015. 8vo Taller de Física de la Materia Condensada y Molecular.  
Ponencia: Formulación Lagrangiana de la Ecuación Sturm-Liouville matricial: Caso particular del campo Electromagnético. René Pernas Salomón y Rolando Pérez Álvarez.  
Cartel: Aplicación de variantes numéricamente estables del MMT derivadas de la Ecuación Sturm-Liouville matricial. René Pernas Salomón y Rolando Pérez Álvarez; Zorayda Lazcano Ortiz y Jesús Arriaga Rodríguez, José Alberto Briones Torres e Isaac Rodríguez Vargas. Organizador: Cuerpo académico de Física del Estado Sólido, Facultad de Ciencias de la Universidad Autónoma del Estado de Morelos. 12-14 enero de 2015. México.
2. 2014. XIII Simposio y XI Congreso de la Sociedad Cubana de Física. Cartel: Relaciones entre matrices de transferencia y sus consecuencias en el problema  $\Omega d$ . René Pernas Salomón y Rolando Pérez Álvarez. Organizador: Sociedad Cubana de Física. 16 - 21 de Marzo de 2014. Universidad de la Habana, Cuba.
3. 2014. XVII International Workshop on Wavelets, Differential Equations, Mechanics, Number Theory and Financial Mathematics. Ponencia: General form of the Green's function regular at infinity

- for the homogeneous Sturm-Liouville matrix operator. René Pernas Salomón y Rolando Pérez Álvarez. Organizador: Facultad de Matemáticas y Computación de la Universidad de la Habana, Cuba y Departamento de Matemáticas y Estadísticas de la Universidad de Concordia, Montreal, Canadá. 17-21 Febrero de 2014. Facultad de Matemáticas de la Universidad de la Habana, Cuba.
4. 2014. 7mo Taller de Física de la Materia Condensada y Molecular. Ponencia: Relaciones entre matrices de transferencia y análisis de la inestabilidad numérica (problema  $\Omega d$ ). René Pernas Salomón y Rolando Pérez Álvarez. Ponencia: Ubicuidad del problema Sturm-Liouville matricial en los problemas a capas. Rolando Pérez Álvarez y René Pernas Salomón. Organizador: Cuerpo académico de Física del Estado Sólido, Facultad de Ciencias de la Universidad Autónoma del Estado de Morelos. 13-16 enero de 2014. México.
  5. 2013. II Taller internacional de materiales nanoestructurados. Ponencia: Función de Green regular en el infinito del operador Sturm-Liouville matricial homogéneo. Rolando Pérez Álvarez y René Pernas Salomón. NANOANTIOQUIA 2013. 15-19 julio de 2013. Organizador: Universidad de Antioquia. Medellín, Colombia.
  6. 2013. 6to Taller de Física de la Materia Condensada y Molecular. Cartel: Forma general de la función de Green regular en el infinito para el operador de Sturm-Liouville matricial. René Pernas Salomón y Rolando Pérez Álvarez. Organizador: Cuerpo académico de Física del Estado Sólido, Facultad de Ciencias de la Universidad Autónoma del Estado de Morelos. 7-10 enero de 2013. México.

## Publicaciones en otros eventos

1. 2013. 4ta Jornada de Ingeniería y Ciencias Aplicadas y el 5to Congreso de la Licenciatura y Posgrado en Ciencias. Cartel: Problema de Sturm-Liouville matricial en el estudio de diversas excitaciones elementales en sistemas a capas. René Pernas Salomón y Rolando Pérez Álvarez. Organizador: Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma del Estado de Morelos (UAEM) y Centro de Investigación en Ingeniería y Ciencias Aplicadas (CIICAp). Mayo de 2013. CIICAp. Universidad Autónoma del Estado de Morelos, México.

# Resumen

El estudio de excitaciones elementales en heteroestructuras o sistemas a capas mantiene un lugar preponderante en las investigaciones básicas por su importancia en el desarrollo de dispositivos con diversas aplicaciones tecnológicas. Las ecuaciones de movimiento que describen la dinámica de estas excitaciones elementales, por lo general siguen un mismo modelo de ecuación: La Ecuación Sturm-Liouville matricial (ESLM). Otro aspecto en común es el uso sistemático del método de la función de Green o del método de la matriz de transferencia (MMT) para la solución de dichas ecuaciones y del problema de contorno planteado en el sistema a capas. A pesar de ello la solución para la degradación numérica (el problema  $\Omega - d$ ) que con frecuencia afecta las aplicaciones numéricas del MMT no había sido abordada analíticamente en un marco general como el de la ESLM. El problema  $\Omega - d$  conduce a soluciones erróneas en los cálculos donde se presenta.

Para evadir o paliar dicha degradación numérica se han reportado variantes del MMT. Sin embargo, debido a que con estas propuestas se analizaban problemas específicos de propagación de ondas en sistemas elásticos o piezoeléctricos, no existían garantías de que dichas variantes podían ser aplicadas con el mismo éxito en otros problemas de propagación de ondas. Tampoco se contaba con una respuesta satisfactoria a la pregunta de porqué algunas matrices tienen la capacidad de evadir el problema  $\Omega - d$  mientras que otras no.

Lo expresado arriba constituyó una motivación para este trabajo y conforma uno de los objetivos generales de esta tesis: Desarrollar una técnica analítica que permita determinar variantes del MMT con la capacidad de evadir el problema  $\Omega - d$ , en el marco general de la Ecuación Sturm-Liouville matricial. La técnica que se propone permite explicar porqué las variantes analizadas son numéricamente estables. La importancia de este novedoso trabajo radica en que los resultados son aplicables a todo sistema de ecuaciones de movimiento que siga el modelo Sturm-Liouville matricial para una heteroestructura compuesta de dominios homogéneos, donde los coeficientes de la ESLM dependen de la coordenada perpendicular a las intercaras pero son constantes por tramos. A diferencia del método de la matriz global, tomado como referencia por algunos autores, las matrices que proponemos como numéricamente estables se caracterizan porque sus dimensiones no dependen del número de capas o dominios que conforman la heteroestructura, consiguiendo así optimizar los cálculos.

Por otra parte, partiendo de la ESLM y aplicando el método estándar de la transformada de Fourier, así como técnicas de integración por residuos, en particular el lema de Jordan, se obtuvo una forma general y compacta para la función de Green del medio homogéneo con condiciones de regularidad en el infinito. La novedosa expresión permite de forma sencilla y directa obtener una función de Green para cada dominio homogéneo de la heteroestructura las que a su vez podrán ser utilizadas para calcular la función de Green de toda la heteroestructura con ayuda método de empalme de funciones de Green (SGFM). A partir de la mencionada expresión, se obtuvo esta función de Green para varios modelos físicos. Utilizando la condición de salto característica de la primera derivada de la función de Green se obtuvo una ecuación algebraica para verificar su validez.

Las aplicaciones para los resultados de esta tesis son múltiples y variadas. Ejemplo de ello es el análisis de varios problemas físicos de interés práctico que validan la eficacia de las matrices numéricamente estables propuestas en esta tesis. En cada problema se muestra que su solución mediante la aplicación del MMT estándar conduce a errores causados por degradaciones numéricas.

# Abstract

The study of elementary excitations in heterostructures (layered systems) remains a topic of interest on basic research because of its importance for the development of devices with different technological applications. The equations of motion that describe the dynamics of these elementary excitations generally follow the same model equation: The Matrix Sturm-Liouville Equation (MSLE). Another common aspect is the systematic use of the Green's function method and/or the transfer matrix method (TMM) to solve these equations and the boundary value problem posed for the layered system. However, the solution for the numerical degradation (the  $\Omega - d$  problem) that often affects the numerical applications of the TMM, had not been addressed analytically in a general framework like the MSLE. The  $\Omega - d$  problem leads to wrong solutions in the calculations where it occurs.

To avoid the  $\Omega - d$  problem some transfer matrix variants have been reported in previous works. However, since these proposals were used to analyze specific problems of wave propagation in elastic or piezoelectric layered systems, there was no guarantee that these variants could be applied with equal success to other wave propagation problems. Moreover, there was not a satisfactory answer to the question of why some matrices have the ability to avoid the  $\Omega - d$  problem while others matrices can not.

The above statement was a motivation for this work and supports one of the general objectives of this thesis: Develop an analytical technique to determine variants of TMM with the ability to avoid the  $\Omega - d$  problem, in the general framework of the Matrix Sturm-Liouville Equation. The proposed approach explains why the analyzed TMM variants are numerically stable. The importance of this novel work is that the results are applicable to any system of equations of motion that follow the matrix Sturm-Liouville model in a heterostructure composed of homogeneous layers where the MSLE coefficients depend on the coordinate perpendicular to the interfaces but they are piecewise constant. In contrast to the global matrix method, which is often used as a benchmark to model multilayered structures, we propose numerically stable transfer matrices whose dimensions are independent of the number of layers in the structure, thus optimizing calculations.

Moreover, by applying the standard Fourier transform method to the corresponding MSLE, a general and compact form for the Green's function (GF) regular at infinity was obtained for the homogeneous Sturm-Liouville matrix operator. The integration to obtain the GF was performed by residue theorem together with the Jordan's lemma. The derived expression is applied to each homogeneous layer of the heterostructure to subsequently determine the Greens function of the matched system by means of the Surface Green Function Matching (SGFM) method. The general and compact form of the Green's function was applied to different physical models. Using the jump condition in the first derivative of the Green's function, an algebraic equation to verify the validity of the calculated Greens function was obtained too.

The applications for the outcomes of this thesis are multiple and varied. An example of this is the analysis of several problems of practical interest that validate the effectiveness of the numerically stable matrices proposed in this thesis. In each problem it is shown that its solution through the application of the standard TMM leads to errors caused by numerical degradations.

# Abreviaturas

---

---

ESLM	Ecuación Sturm-Liouville Matricial
MMT	Método de la Matriz de Transferencia
SGFM	Método de Empalme de Funciones de Green en Superficies (Surface Green Function Matching Method, en <i>inglés</i> )
QEP	Problema Cuadrático de Eigenvalores (Quadratic Eigenvalue Problem, en <i>inglés</i> )
SMM	Modelo Matemático Simple (Simple Mathematical Model, en <i>inglés</i> )
LI	Se refiere a soluciones o bases de soluciones Linealmente Independientes
MFC	Modelo Fenomenológico Completo
EFA	Aproximación de la Función Envolvente (Envelope Function Approximation, en <i>inglés</i> )
EMT	Teoría de Masa Efectiva (Effective Mass Theory, en <i>inglés</i> )
FM	Se refiere a condiciones de Empalme Total (Full Matching, en <i>inglés</i> )
TH	Transversal Horizontal
FL	Factor de Localización
MCG	Monocapa de Grafeno
DCG	Doble Capa de Grafeno
RF	Resonancia Fano
OEM	Ondas Electromagnéticas
EFSP	Espejo Fotónico de Silicio Poroso
SH	Se refiere a un tipo de ondas Transversales Horizontales (Shear Horizontal, en <i>inglés</i> )
MMG	Método de la Matriz GLobal
SVD	Se refiere a la técnica de Descomposición del Valor Singular (Singular Value Decomposition, en <i>inglés</i> )

# Capítulo 1

## Antecedentes y objetivos de la tesis

### 1.1 Introducción general

El problema Sturm-Liouville Matricial (SLM) aparece de forma natural en diversos campos de estudio de la Física y la tecnología. Entre los problemas físicos más comunes cuyas ecuaciones de movimiento se rigen por el patrón Sturm-Liouville Matricial encontramos los que derivan de la teoría de la Elasticidad [1, 2, 3] y el Electromagnetismo [4], algunos con cierto grado de complejidad como la propagación de ondas magneto-electro-elásticas [5]. Este tipo de patrón lo encontramos también en las ecuaciones fundamentales de varias aplicaciones ingenieriles [6]. El problema SLM no solo aparece en áreas de la Física Clásica, también es frecuente en la Mecánica Cuántica y la Física del Estado Sólido. En particular la descripción de estados electrónicos en la Aproximación de la Función Envolvente (EFA) [1, 7] genera un conjunto extenso de ecuaciones de movimiento que siguen el patrón SLM.

En su forma original, muchas de las referidas ecuaciones de movimiento son tridimensionales. Sin embargo, debido a que la mayoría de las heteroestructuras de interés presentan geometría planar, ver figura 1.1, los modos normales pueden ser seleccionados como exponenciales de  $i\vec{\kappa} \cdot \vec{\rho}$  multiplicados por alguna función de la variable  $z$ , la coordenada perpendicular a las intercaras. Con  $\vec{\rho} = x\vec{e}_x + y\vec{e}_y$  hemos denotado el vector de posición en el plano de las intercaras y con  $\vec{\kappa} = \kappa_x\vec{e}_x + \kappa_y\vec{e}_y$  el vector de onda correspondiente. La sustitución de estos modos en el sistema de ecuaciones original conduce a la forma Sturm-Liouville Matricial, dígase:

$$\mathbf{L}(z) \cdot \mathbf{F}(z) \equiv \frac{d}{dz} \left[ \mathbf{B}(z) \cdot \frac{d\mathbf{F}(z)}{dz} + \mathbf{P}(z) \cdot \mathbf{F}(z) \right] + \mathbf{Y}(z) \cdot \frac{d\mathbf{F}(z)}{dz} + \mathbf{W}(z) \cdot \mathbf{F}(z) = \mathbf{0}_{N \times 1}. \quad (1.1)$$

La ecuación maestra (1.1) define el operador Sturm-Liouville Matricial  $\mathbf{L}(z)$  y se trata de un sistema de  $N$  ecuaciones diferenciales de segundo orden acopladas. La incógnita  $\mathbf{F}(z)$  es el campo a estudiar y se describe mediante  $N$  componentes, p. ej. las cuatro funciones envolventes de un modelo de cuatro bandas de una estructura de banda electrónica, o las tres amplitudes de vibración de una onda elástica, o las componentes del campo eléctrico en algunos problemas de Electrodinámica. En el caso del modelo fenomenológico completo (MFC) para modos ópticos polares en heteroestructuras [2] el campo  $\mathbf{F}(z)$  viene dado por tres amplitudes mecánicas y una componente que puede ser interpretada como un potencial electrostático acoplado [2].

Los coeficientes  $\mathbf{B}(z)$ ,  $\mathbf{P}(z)$ ,  $\mathbf{Y}(z)$  y  $\mathbf{W}(z)$  son matrices cuadradas de orden  $N$  y describen las propiedades de los materiales que conforman la heteroestructura: coeficientes elásticos, dieléctricos, piezoelectricos, etc. Como en general las heteroestructuras se componen de diferentes materiales, estos coeficientes podrán tomar valores diferentes al pasar de un dominio a otro de la heteroestructura. El punto  $\cdot$  representa el producto estándar de matrices.

La formulación (1.1) implica que las ecuaciones diferenciales se han planteado para toda la heteroestructura. Esto significa que las condiciones de empalme surgen directamente del análisis matemático mediante la primera integración alrededor de las superficies de empalme. En esta formulación *global* los problemas de empalme quedan formulados de forma diferente a la formulación por tramos consistente en resolver por separado las ecuaciones para el dominio local de cada medio constituyente y después empalmar las soluciones en cada intercara. En el marco de una formulación *global* estándar del problema destaca por sus propiedades la forma diferencial lineal del operador  $\mathbf{L}(z)$ :

$$\mathbf{A}(z) = \mathbf{B}(z) \cdot \frac{d\mathbf{F}(z)}{dz} + \mathbf{P}(z) \cdot \mathbf{F}(z). \quad (1.2)$$

La primera integración de (1.1) entre  $z - \epsilon$  y  $z + \epsilon$  [8] revela la propiedad que tiene  $\mathbf{A}(z)$  de ser continua en todo  $z$  a lo largo de la heteroestructura. La continuidad del campo  $\mathbf{F}(z)$  y de la forma diferencial lineal  $\mathbf{A}(z)$  a todo lo largo de la heteroestructura es el principio básico en el que se sustentan las reglas de composición (sección 3.3) de las matrices de transferencia definidas a partir de estas magnitudes.

Los temas a tratar en esta tesis estarán centrados en dos herramientas de gran utilidad para la solución de la ecuación maestra (1.1) en heteroestructuras. Nos referimos al método de la matriz de transferencia y al método de la función de Green.

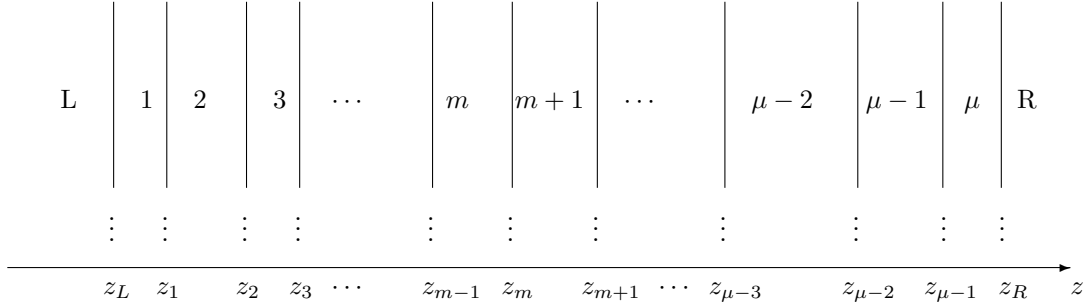


Figura 1.1: Esquema general de una heteroestructura compuesta de  $\mu$  capas emparedadas entre dos dominios externos semi-infinitos: L (a la izquierda) and R (a la derecha). De acuerdo con nuestra convención, la capa  $m$  está limitada por las intercara  $(m - 1)$  y  $m$  con coordenadas  $z_{m-1}$  y  $z_m$  respectivamente.

## 1.2 Excitaciones elementales que originan problemas de Sturm-Liouville Matriciales

Un glosario de problemas físicos cuyas ecuaciones de movimiento siguen el patrón (1.1) se puede encontrar en [8] donde además se abordan técnicas de matrices de transferencia y de funciones de Green para la



solución de la ecuación Sturm-Liouville matricial. La tabla 1.1 contiene un listado de estos problemas. En esta sección se comentará una parte de estos problemas, el resto es tratado en el capítulo 2.

En la tabla 1.1 se ha denotado con  $\vec{u} = (u_x, u_y, u_z)$  la amplitud de vibración de las ondas elásticas;  $\tau$  es el tensor de tensiones;  $\varphi$ , el potencial eléctrico;  $\mathcal{D}$ , el vector desplazamiento eléctrico y  $\hat{\epsilon}$  el tensor permitividad. El supraíndice  $T$  indica la operación de transposición. Las coordenadas espaciales son indicadas indistintamente como  $(x, y, z)$  o en el mismo orden  $(1, 2, 3)$ , según la conveniencia. EFA- $N$  significa Aproximación de la Función Envolvente para  $N$  bandas.

### Teoría de masa efectiva

Como primer problema se considera la Aproximación de la Función Envolvente en una banda. Usualmente el rango de energía de interés es aquel cercano al borde de la banda y de esta forma se recurre a una aproximación parabólica para la relación de dispersión y se utiliza la teoría de masa efectiva. La ecuación para la función de onda electrónica en una heteroestructura planar será:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left[ \frac{1}{m^*(z)} \frac{dF(z)}{dz} \right] + \left[ V(z) + \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m^*(z)} - E \right] F(z) = 0, \quad (1.3)$$

donde  $m^*$  es la masa efectiva de los electrones y  $\vec{\kappa} = \kappa_x \vec{e}_x + \kappa_y \vec{e}_y$  es el vector de onda de los modos normales:  $F(\vec{r}) = F(z) e^{i\vec{\kappa} \cdot \vec{\rho}}$ . En el problema tridimensional  $V$  es la diferencia entre los niveles de energía del borde de la banda al pasar de un dominio a otro de la heteroestructura, la diferencia en el valor numérico de  $V$  es el conocido band offset o desplazamiento de banda. En el problema unidimensional a  $V(z) + \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m^*(z)}$  se le conoce como potencial efectivo.

### Electrostática

Problema 2 de la tabla 1.1. La ecuación del campo es la ecuación de Poisson [9] y ahora la amplitud es el potencial electrostático  $\varphi(z)$ . El tensor permitividad  $\hat{\epsilon}$  se considera dependiente de  $z$  y de la frecuencia  $\omega$ .

### Modos ópticos polares: modelo dieléctrico

Problema 5. Al igual que en el problema anterior, el campo es el potencial electrostático  $\varphi(z)$  quien también depende de la frecuencia  $\omega$  al igual que el tensor permitividad  $\hat{\epsilon}$ . La ecuación diferencial es la ecuación de Poisson.

### Otros problemas de la tabla 1.1

Problema 11 ( $N = 4$ ) se basa en el hamiltoniano de Kohn-Luttinger, el cual describe dos bandas acopladas (electrones y huecos) e incluye el espín. En este caso  $\mathbf{F}$  es el vector compuesto por las funciones envolventes involucradas [10].

Problema 12 concerniente al Hamiltoniano de Pötz, Porod y Ferry (PPF) [11]. En este caso cuatro bandas son acopladas y se incluye el espín de manera que  $N = 8$ .

Rössler [12] introdujo Hamiltonianos de ocho (problema 13) y catorce (problema 14) bandas sin considerar el espín. Por tanto  $\mathbf{F}$  es el vector de  $N$  componentes compuesto de las funciones envolventes involucradas, con  $N = 8$  y  $N = 14$ , respectivamente.

Problema 16: LCMCT, se refiere a tunelaje multicanal generado por confinamiento lateral (lateral confinement multichannel tunneling, en *inglés*) los detalles se pueden encontrar en [13, 14].

Para exponer los resultados de esta tesis se estudiaron las ecuaciones Sturm-Liouville matriciales de los problemas físicos listados en la tabla 2.1 y de los problemas tratados en el capítulo 5.

Problema	$N$	$\mathbf{F}(z)$	$\mathbf{A}(z)$	Tipo de ecuación	Problema físico
1	1	$F$	$F'/m^*$	Difusión	EFA-1: EMT
2	1	$\varphi$	$\hat{\epsilon}_{33}\varphi'$	Onda	Electrostática
3	1	$u_x$	$\tau_{i3}$	Onda	Modos acústico TH
4	1	$u_x$	$\tau_{i3}$	Onda	Modos ópticos TH
5	1	$\varphi$	$\mathcal{D}_z$	Onda	Modos ópticos polares: Modelo dieléctrico
6	2			Difusión	EFA-2: Dimmock
7	2	$[u_y, u_z]^T$	$\tau_{i3}$	Ondas	Modos elásticos sagitales
8	2				Modelo de Bogolioubov
9	3	$[u_y, u_z, \varphi]^T$	$\tau_{i3}, \mathcal{D}_z$	Onda	Modos ópticos polares. MFC
10	3	$[u_y, u_z, \varphi]^T$		Ondas	Modos piezoeléctricos
11	4			Difusión	EFA-4: Kohn-Luttinger
12	8			Difusión	EFA-8: PPF
13	8			Difusión	EFA-8
14	14			Difusión	EFA-14: Rössler
15	$N$			Difusión	Pseudopotenciales locales
16	$N$			Difusión	LCMCT

Tabla 1.1: Algunos casos típicos de sistemas de ecuaciones diferenciales de segundo orden que siguen el patrón Sturm-Liouville matricial. Tomado de [8]. La amplitud  $\mathbf{F}$  y la forma diferencial lineal  $\mathbf{A}$  se muestran explícitamente para los casos estudiados en [8].

### 1.3 Ubicuidad del problema Sturm-Liouville matricial

En las secciones precedentes se ha ilustrado con ejemplos concretos la amplia gama de problemas cuyas ecuaciones de movimiento siguen un patrón Sturm-Liouville matricial (1.1). Sin embargo para demostrar el carácter ubicuo del problema Sturm-Liouville matricial se comprobó que la ecuación maestra (1.1) puede obtenerse a partir de una Densidad Lagrangiana (DL) que considera todos los posibles términos que conducen a ecuaciones de movimiento lineales.

La Densidad Lagrangiana postulada es:

$$\begin{aligned}
\mathcal{L} = & \frac{1}{2} \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial t} \cdot \boldsymbol{\rho} \cdot \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial t} + \frac{1}{2} \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial t} \cdot \boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{F} + \frac{1}{2} \mathbf{F} \cdot \boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{F} \\
& + \frac{1}{2} \nabla \mathbf{F} : \boldsymbol{\lambda} : \nabla \mathbf{F} + \mathbf{F} \cdot \boldsymbol{\mu} : \nabla \mathbf{F} + \nabla \mathbf{F} : \boldsymbol{\chi} \cdot \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial t} .
\end{aligned} \tag{1.4}$$

Aquí  $\mathbf{F}$  es un vector de  $N$  componentes dependiente de la posición  $\vec{r}$  y del tiempo  $t$ . En general los parámetros que intervienen en esta expresión ( $\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\gamma}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}$  y  $\boldsymbol{\chi}$ ) son tensores dependientes de la posición. De acuerdo con los productos en los que aparecen involucrados estos tensores el número de elementos de cada uno de ellos es:  $N \times N$  para  $\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\Omega}$  y  $\boldsymbol{\gamma}$ ;  $3 \times N \times 3 \times N$  para  $\boldsymbol{\lambda}$ ;  $N \times 3 \times N$  para  $\boldsymbol{\mu}$  y  $3 \times N \times N$  para  $\boldsymbol{\chi}$ .

El primer/segundo término en (1.4) es cuadrático/lineal en la derivada con respecto al tiempo y son los que nos conducen a la ecuación de movimiento del tipo onda/difusión.

Escribiendo (1.4) en notación expandida las ecuaciones de movimiento se obtienen a partir de la ecuación de Euler-Lagrange. De esta forma se pueden identificar claramente los términos de (1.4) que conducen a ecuaciones de movimiento conocidas. Por ejemplo: las ecuaciones de la elasticidad (C.1) pueden obtenerse

a partir de la densidad Lagrangiana:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial t} \cdot \boldsymbol{\rho} \cdot \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial t} + \frac{1}{2} \nabla \mathbf{F} : \boldsymbol{\lambda} : \nabla \mathbf{F}; \quad \mathbf{F} = \vec{u}. \quad (1.5)$$

Comparando la densidad Lagrangiana postulada para el modelo Fenomenológico completo [2] con (1.4) resulta que esta última debe conservar los elementos:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial t} \cdot \boldsymbol{\rho} \cdot \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial t} + \frac{1}{2} \mathbf{F} \cdot \boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{F} + \frac{1}{2} \nabla \mathbf{F} : \boldsymbol{\lambda} : \nabla \mathbf{F} + \mathbf{F} \cdot \boldsymbol{\mu} : \nabla \mathbf{F}, \quad (1.6)$$

donde  $\mathbf{F} = (\vec{u}, \varphi)$ , ver apéndice B.

Un caso interesante resulta la formulación Lagrangiana del campo electromagnético. Las ecuaciones de Maxwell en un medio anisotrópico pueden obtenerse a partir de la siguiente DL que es un caso particular de (1.4):

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^3 \sum_{\beta=1}^3 \partial_t A_\alpha \hat{\epsilon}_{\alpha\beta} \partial_t A_\beta \\ & + \frac{1}{2} \sum_i \sum_j \partial_i A_0 \hat{\epsilon}_{ij} \partial_j A_0 \\ & + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{\alpha=1}^3 \sum_j \sum_{\beta=1}^3 \partial_i A_\alpha \left\{ \sum_p \sum_n e_{i\alpha p} \hat{\nu}_{pn} e_{nj\beta} \right\} \partial_j A_\beta \\ & + \sum_i \sum_{\beta=1}^3 \partial_i A_0 \hat{\epsilon}_{i\beta} \partial_t A_\beta. \end{aligned} \quad (1.7)$$

Aquí  $\mathbf{F} = (A_0, A_1, A_2, A_3)^T$  contiene el potencial eléctrico  $A_0$  y las componentes del vector potencial magnético. Con  $\hat{\epsilon}$  denotamos el tensor permitividad y  $\hat{\nu}$  representa el inverso del tensor permeabilidad magnética  $\hat{\mu}$ . El símbolo  $e_{mjn}$  denota al tensor completamente antisimétrico de tres índice. Comparando (1.7) y (1.4) se obtiene que:

$$\left. \begin{aligned} \rho_{\alpha\beta} &= \epsilon_{\alpha\beta}; \\ \lambda_{i0j0} &= \epsilon_{ij}; \\ \lambda_{i\alpha j\beta} &= \sum_{p=1}^3 \sum_{n=1}^3 e_{i\alpha p} \nu_{pn} e_{nj\beta}; \\ \chi_{i0\beta} &= \epsilon_{i\beta} \end{aligned} \right\} i, j, \alpha, \beta = 1, 2, 3; \quad (1.8)$$

El resto de los elementos que componen  $\boldsymbol{\rho}$ ,  $\boldsymbol{\lambda}$  y  $\boldsymbol{\chi}$  son nulos.

Dado que los potenciales componentes de  $\mathbf{F}$  son definidos a partir de las ecuaciones de Maxwell homogéneas:  $\nabla \cdot \vec{B} = 0$  and  $\nabla \times \vec{E} + \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = 0$ , estas últimas se obtienen directamente de dichas definiciones. Se puede comprobar aplicando la ecuación de Euler-Lagrange que (1.7) conduce a la ley de Gauss y a la ley Ampère en un medio libre de las fuentes del campo EM:

$$\nabla \cdot \vec{D} = 0; \quad (1.9)$$

$$\nabla \times \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}. \quad (1.10)$$

Para obtener las ecuaciones inhomogéneas solo habría que adicionar a (1.7) el término  $\sum_{\alpha=0}^3 \mathbf{J}_\alpha A_\alpha$  donde  $\mathbf{J} = (-\rho, j_1, j_2, j_3)^T$ ,  $\rho$  la densidad volumétrica de carga libre y  $j_1, j_2, j_3$  las componentes del vector densidad de corriente eléctrica  $\vec{j}$ .

Finalmente retomemos el análisis general de (1.4). La correspondiente ecuación de movimiento viene dada por la ecuación de Euler-Lagrange:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_t F_\alpha)} \right) + \sum_k \partial_k \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_k F_\alpha)} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial F_\alpha} = 0. \quad (1.11)$$

Supongamos que tenemos un sistema a capas (heteroestructura) en la cual los parámetros (masa efectiva, coeficientes elásticos, dieléctricos, potenciales, etc.) dependen solo de la coordenada cartesiana  $z$  perpendicular a las intercaras de la heteroestructura. Entonces la invarianza ante traslaciones arbitrarias en el plano de las intercaras permite escoger las componentes de  $\mathbf{F}$  en la forma:

$$F_\alpha(\vec{r}, t) = F_\alpha(z) \mathbf{e}^{i(\vec{\kappa} \cdot \vec{\rho} - \omega t)}. \quad (1.12)$$

Sustituyendo esta expresión en la ecuación que se obtiene de (1.11), después de varias operaciones algebraicas se obtiene la ecuación maestra (1.1) con los coeficientes:

$$B_{\beta\alpha} = \frac{1}{2}(\lambda_{3\beta 3\alpha} + \lambda_{3\alpha 3\beta}), \quad (1.13)$$

$$P_{\beta\alpha} = \frac{1}{2} \sum_i^2 i \kappa_i (\lambda_{3\beta i\alpha} + \lambda_{i\alpha 3\beta}) + \mu_{\alpha 3\beta} - i\omega \chi_{3\beta\alpha}, \quad (1.14)$$

$$Y_{\beta\alpha} = \frac{1}{2} \sum_k^2 i \kappa_k (\lambda_{k\beta 3\alpha} + \lambda_{3\alpha k\beta}) - \mu_{\beta 3\alpha} - i\omega \chi_{3\alpha\beta}, \quad (1.15)$$

$$\begin{aligned} W_{\beta\alpha} = & -\frac{1}{2} \sum_k^2 \sum_i^2 \kappa_k \kappa_i (\lambda_{k\beta i\alpha} + \lambda_{i\alpha k\beta}) + i \sum_k^2 \kappa_k \mu_{\alpha k\beta} - i \sum_j^2 \kappa_j \mu_{\beta j\alpha} \\ & -\frac{1}{2} \omega^2 (\rho_{\beta\alpha} + \rho_{\alpha\beta}) - \frac{1}{2} (\gamma_{\beta\alpha} + \gamma_{\alpha\beta}) \\ & + \omega \sum_i^2 \kappa_i \chi_{i\alpha\beta} + \omega \sum_k^2 \kappa_k \chi_{k\beta\alpha} + \frac{1}{2} i\omega (\Omega_{\alpha\beta} - \Omega_{\beta\alpha}) \end{aligned} \quad (1.16)$$

$$\alpha, \beta = 0, 1, 2, 3, 4.$$

## 1.4 Visión general de la función de Green

Por definición la función de Green  $\mathbf{G}(z, z')$  del operador diferencial  $\mathbf{L}(z)$  es la solución de la ecuación:

$$\begin{aligned} & \mathbf{L}(z) \cdot \mathbf{G}(z, z') \equiv \\ & \frac{d}{dz} \left[ \mathbf{B}(z) \cdot \frac{d\mathbf{G}(z, z')}{dz} + \mathbf{P}(z) \cdot \mathbf{G}(z, z') \right] + \mathbf{Y}(z) \cdot \frac{d\mathbf{G}(z, z')}{dz} + \mathbf{W}(z) \cdot \mathbf{G}(z, z') = \mathbf{I}_N \delta(z - z'). \end{aligned} \quad (1.17)$$

Nótese que ahora la ecuación maestra (1.1) es inhomogénea, con  $\mathbf{I}_N$  se ha denotado la matriz identidad de orden  $N$ . La función  $\mathbf{G}(z, z')$  no solo es un atributo del sistema diferencial, sino también una consecuencia de las condiciones de contorno. Para el operador  $\mathbf{L}(z)$  se tendrán tantas  $\mathbf{G}(z, z')$ s como condiciones de contorno se impongan. Matemáticamente, la función  $\mathbf{G}(z, z')$  es el resolvente para un problema físico dado. A diferencia  $\mathbf{F}(z)$  quien es un vector de  $N$  componentes, la función  $\mathbf{G}(z, z')$  es una matriz de orden  $N \times N$ .

Como consecuencia de la inhomogeneidad del sistema diferencial (1.17), dada por un término tipo delta de Dirac, su solución resulta automáticamente normalizada lo que es de mucha utilidad en la práctica.

Debido al hecho de que  $\mathbf{G}(z, z')$  incorpora las condiciones de contorno, esta contiene en sí misma la información física concerniente al problema bajo estudio y en consecuencia, propiedades de interés físico como funciones espectrales pueden ser determinadas mediante una expresión obtenida directamente de  $\mathbf{G}(z, z')$ . Por ejemplo, para el caso de la ecuación de Schrödinger la densidad local de estados se puede determinar mediante la expresión [8]:

$$\mathcal{N}(\Omega; z) = -\frac{1}{\pi} \text{Im Tr } \mathcal{G}(z), \quad (1.18)$$

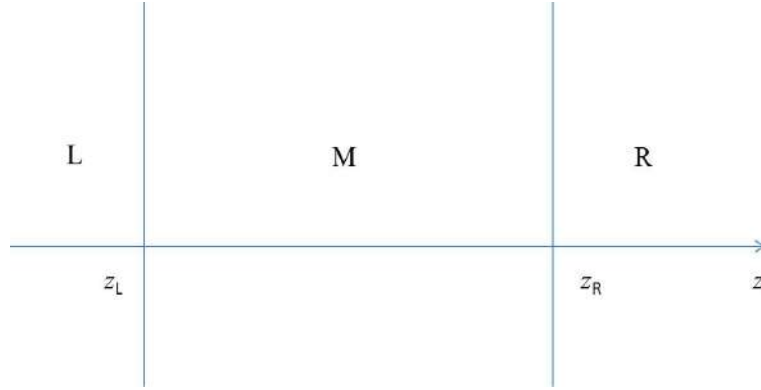


Figura 1.2: Descripción simplificada de una heteroestructura. Configuración L – M – R donde el dominio intermedio M puede ser una simple capa o un compuesto.

donde el eigenvalor  $\Omega$  representa la energía de los estados en el problema mencionado. Aquí  $\text{Im}$  indica la parte imaginaria de la traza ( $\text{Tr}$ ) de la proyección de  $\mathbf{G}(z, z')$  cuando  $z' \rightarrow z$ .

La continuidad de  $\mathbf{G}(z, z')$  en todo  $z$  la convierte en una alternativa apropiada para el estudio de heteroestructuras. En estos casos el estudio de los problemas de empalme se suele abordar con el Método de Empalme de Funciones de Green en Superficies (SGFM). Los detalles de este método así como numerosos ejemplos de su aplicación vienen dados en [9]. En nuestro trabajo asumiremos heteroestructuras compuestas de dominios homogéneos, donde los coeficientes de (1.1) dependen de  $z$  pero son constantes por tramos. Una vez conocida la  $\mathbf{G}(z, z')$  para cada dominio constituyente, el problema de empalme se puede resolver con el mencionado SGFM cuyo resultado es una función de Green para la heteroestructura. Por esta razón el capítulo 2 está enfocado a obtener una forma general y compacta para la función de Green del medio homogéneo.

## 1.5 Visión general de las matrices de transferencia

Una herramienta muy común para el estudio de heteroestructuras es el método de la matriz de transferencia. El término matriz de transferencia ha sido utilizado de formas muy diversas para denotar diferentes objetos, por ejemplo, las matrices que transfieren coeficientes, o diferentes clases de matrices que transfieren amplitudes y derivadas de primer orden. Asumiendo que los teoremas de existencia y unicidad de la solución aplican a nuestra ecuación maestra, dada una solución  $\mathbf{F}(z)$  del sistema diferencial en un algún punto inicial, podemos obtener  $\mathbf{F}(z)$  en otro punto final utilizando la matriz de transferencia apropiada, lo que equivale a decir que el sistema diferencial ha sido integrado. Desde el punto de vista matemático, las matrices de transferencia proporcionan la solución de un sistema diferencial, dados los valores iniciales.

En nuestro trabajo asumiremos heteroestructuras compuestas de dominios homogéneos, donde los coeficientes de (1.1) dependen de  $z$  pero son constantes por tramos. Para los mencionados dominios es posible escribir un conjunto de soluciones linealmente independientes  $\mathbf{F}_\ell(z)$  ( $\ell = 1, \dots, 2N$ ), que satisfacen la ecuación maestra (1.1). Entonces las soluciones  $\mathbf{F}(z)$  pueden ser expresadas como una combinación lineal de las  $\mathbf{F}_\ell(z)$  y se pueden desarrollar algoritmos algebraicos, analíticos, para obtener la matriz de transferencia de toda la heteroestructura [8]. En el capítulo 3 se emplean dichos algoritmos para obtener las expresiones que permiten determinar las matrices que se estudian en esta tesis.

Para definir algunos tipos de matrices, obtener reglas de composición, o formular problemas de contorno se utilizará una descripción simplificada de la heteroestructura de la figura 1.1. Se trata de la configuración L – M – R, ver figura 1.2. La simplificación es útil cuando en el análisis no es relevante la composición del dominio interno M.

## 1.6 Problema $\Omega - d$

Desde el punto de vista formal el método de la matriz de transferencia (MMT) se considera apropiado para el estudio de la propagación de ondas en heteroestructuras (sistemas multicapas). Sin embargo en sus aplicaciones prácticas dicho método puede verse obstaculizado por inestabilidades numéricas [8, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24], siendo la más común el problema  $\Omega - d$  [8, 15]. El nombre asociado a esta inestabilidad numérica se debe a los estudios de ondas elásticas en los que dicha inestabilidad se manifiesta a altas frecuencias ( $\omega$ ) y/o grandes espesores ( $d$ ) de las capas. Sin embargo como se explicará en esta sección el problema  $\Omega - d$  puede potencialmente manifestarse en cualquier aplicación numérica del MMT siendo más probable cuando los elementos de la matriz consisten en la suma de términos exponenciales de argumento real positivo con términos exponenciales de argumento real negativo.

Consideremos un dominio homogéneo y analicemos los elementos de una de las matrices de transferencia que con frecuencia se utiliza para el estudio de heteroestructuras. De acuerdo con nuestra nomenclatura esta es la matriz de transferencia asociada, que hemos denotado con  $\mathbf{T}$ . La sección 3.1.2 está dedicada a exponer su definición, comentar algunas propiedades básicas y a las expresiones que permiten su determinación en términos de una base de eigenfunciones de la ESLM.

Supongamos que se ha resuelto el problema cuadrático de autovalores (QEP por sus siglas en Inglés) que nos provee de una base de eigenfunciones  $\mathbf{F}_\ell = \mathbf{F}_{0\ell} \exp[ik_\ell z]$  de la ESLM en un dominio homogéneo (ver sección 2.2) y que dicha base es utilizada para construir la matriz  $\mathbf{T}$ . Como se demuestra en la sección 2.2, bajo las condiciones generales de hermiticidad formal del operador  $\mathbf{L}$  ( $\mathbf{B}^\dagger = \mathbf{B}$ ,  $\mathbf{W}^\dagger = \mathbf{W}$  y  $\mathbf{Y} = -\mathbf{P}^\dagger$ ) los eigenvalores  $k_\ell$  pueden ser reales o aparecer en pares del tipo  $k_\ell$  y su complejo conjugado  $k_\ell^*$ . El símbolo  $\dagger$  significa la transpuesta conjugada de la matriz.

A partir de la expresión (3.9) es posible realizar un análisis de la estabilidad numérica de  $\mathbf{T}$  para cualquier  $N$ . Para eigenvalores  $k_\ell$  reales (regiones clásicamente accesibles) los elementos matriciales de  $\mathbf{T}$  pueden expresarse en términos de funciones trigonométricas acotadas:

$$\mathbf{T}_{js} = \sum_{\ell=1}^{2N} A_{js\ell} [\cos(k_\ell d) + i \sin(k_\ell d)], \quad (1.19)$$

mientras que para eigenvalores complejos (regiones clásicamente inaccesibles) se tendrán combinaciones de exponenciales crecientes y decrecientes:

$$\mathbf{T}_{js} = \sum_{\ell=1}^N C_{js\ell} \tau_\ell e^{|\Im(k_\ell)| d} \left( 1 \pm D_{js\ell} e^{-2|\Im(k_\ell)| d} \right). \quad (1.20)$$

Los coeficientes  $A_{js\ell}$ ,  $C_{js\ell}$  and  $D_{js\ell}$  son independientes del espesor  $d$  del dominio homogéneo y se expresan en términos de elementos de  $\mathbf{F}_{0\ell}$ ,  $\mathbf{B}$  y  $\mathbf{P}$ . En la expresión (1.20) hemos separado las partes real  $\Re(k_\ell)$  e imaginaria  $\Im(k_\ell)$  del eigenvalor  $k_\ell$ . La parte real está incluida en el factor  $\tau_\ell = e^{i\Re(k_\ell)d}$  el cual tiene un valor acotado. Como veremos la mezcla de términos con exponenciales crecientes y decrecientes que aparece en (1.20) puede dar lugar al problema  $\Omega - d$ . Sin embargo para eigenvalores reales, los elementos de  $\mathbf{T}$  (1.19) son expresados mediante funciones trigonométricas las cuales están acotada entre  $\pm 1$  y en dicho caso es poco probable que el problema  $\Omega - d$  surja cuando crece el valor del producto  $(k_\ell d)$ .

Supongamos que el producto  $k_\ell d$  crece lo suficiente como para que el factor  $D_{js\ell} e^{-2|\Im(k_\ell)| d} \approx u$ , siendo  $u$  la unidad de redondeo (*unit roundoff*, en inglés). Este número  $u$  representa la precisión del equipo de cómputo, esto es, el menor valor que cumple la desigualdad:  $1.0 + u > 1.0$ . La unidad de redondeo puede ser calculada utilizando la expresión  $u = \frac{1}{2}\beta^{1-t}$  [25], siendo  $\beta$  la base del sistema coma flotante o punto flotante (*floating point*, en inglés) y  $t$  su precisión (puede entenderse como el número de dígitos utilizados para expresar un valor). A modo de ejemplo: En el sistema decimal de doble precisión ( $\beta = 10$ ,  $t = 16$ ) y se tiene que  $u = 5 \times 10^{-16}$ .

Cuando  $D_{j_{s\ell}} e^{-2|\Im(k_\ell)|d} \approx u$  la computadora redondea la operación  $(1 \pm D_{j_{s\ell}} e^{-2|\Im(k_\ell)|d})$  a 1.0 acarreado un error por dicho redondeo. Entendamos este error como la diferencia entre el valor aproximado de un número, resultado de un cálculo, y su valor matemático exacto. Cuando el resultado del redondeo es 1.0 el valor absoluto de este error  $E_{abs}$  está acotado  $E_{abs} \leq u$  [25]. Si asumimos que el cálculo de un término  $C_{j_{s\ell}} \tau_\ell e^{|\Im(k_\ell)|d} (1 \pm D_{j_{s\ell}} e^{-2|\Im(k_\ell)|d})$  de (1.20) es realizado mediante redondeo, entonces el resultado estará afectado por un error cuyo valor absoluto  $E_r$  viene dado por:

$$E_r \leq C_{j_{s\ell}} \tau_\ell e^{|\Im(k_\ell)|d} u. \quad (1.21)$$

Dependiendo del problema numérico en estudio el miembro derecho de (1.21) puede tener un valor relativamente grande y el error  $E_r$  puede llegar a ser considerable. Una característica del error por redondeo es que puede acumularse cuando el resultado final a obtener es precedido por una secuencia de cálculos sujetos a errores de redondeo. En estos casos el error acumulado puede llegar a dominar el cálculo y producir un resultado final muy inexacto e inaceptable. Cuando esto sucede decimos que estamos en presencia de la degradación numérica llamada problema  $\Omega - d$ . No es de extrañar que este problema sea característico de los estudios de heteroestructuras que consisten en un número suficientemente grande de capas o dominios. Aun cuando ninguno de los dominios sea lo suficientemente largo como para causar el problema  $\Omega - d$  por sí solo, los errores de redondeo, acarreados en el cálculo de la matriz  $\mathbf{T}$  en cada uno de ellos, pueden acumularse y originar esta degradación numérica debido al alto número de matrices involucradas en la multiplicación mediante la cual se obtiene la matriz de toda la heteroestructura.

En la práctica es muy común tratar con problemas del tipo Sturm-Liouville matricial en los cuales el determinante de la matriz  $\mathbf{T}$  es igual a uno o al menos unimodular con independencia del valor  $k_\ell d$ . Esta propiedad de la matriz  $\mathbf{T}$  es abordada en la sección 3.1.2. La importancia práctica de esta propiedad radica en que puede ser utilizada como prueba para evaluar la exactitud numérica de los cálculos realizados con  $\mathbf{T}$ . Cuando la degradación numérica está presente, el determinante de  $\mathbf{T}$  toma valores muy diferentes del valor 1, en algunas ocasiones, por varios órdenes de magnitud.

Por otra parte, la expresión (1.20) muestra claramente que los elementos matriciales  $\mathbf{T}_{j_s}$  crecen indefinidamente cuando el argumento exponencial  $|\Im(k_\ell)|d \rightarrow \infty$ . En este caso la matriz  $\mathbf{T}$  no puede ser calculada numéricamente debido al desbordamiento aritmético (*arithmetic overflow*, en inglés). Si bien este es un tipo de inestabilidad numérica característica de la matriz  $\mathbf{T}$  en este trabajo nos enfocamos en el problema  $\Omega - d$  puesto que ocurre mucho antes que esta, y para valores finitos de  $|\Im(k_\ell)|d$ .

La sección 3.2 estará dedicada al análisis de la estabilidad numérica de algunas variantes del método de la matriz de transferencia que proponemos como capaces de evadir el problema  $\Omega - d$ , en el marco general de la ecuación Sturm-Liouville matricial (caso  $N$ ). Recordemos que  $N$  es el número de ecuaciones diferenciales acopladas de segundo orden involucradas en (1.1). Hacemos notar que dichas variantes se caracterizan por tener dimensiones  $2N \times 2N$  con independencia del número de capas que componen la heteroestructura, a diferencia, por ejemplo, del Método de la Matriz Global [8, 15, 19, 26] utilizado como referencia para evadir el problema  $\Omega - d$  en estructuras a capas. En este método una única matriz, la matriz global (MG), representa todo el sistema. Entonces si la MG fuera construida para una heteroestructura como la representada en la figura 1.1 resultaría rectangular de orden  $2N(\mu + 1) \times 2N(\mu + 2)$  si es construida en términos de la matriz de transferencia de coeficientes o de orden  $2N\mu \times 2N(\mu + 1)$  si es construida en términos de la matriz  $\mathbf{T}$  [8].

## 1.7 Objetivos de la tesis

### 1.7.1 Objetivos relativos a la función de Green

Como se ha mencionado, una vez conocida la función de Green  $\mathbf{G}_m$  de cada dominio  $m$  de la heteroestructura, el problema de empalme puede resolverse aplicando Método de Empalme de Funciones de Green en Superficies (SGFM) cuyo resultado es una función de Green de toda la heteroestructura. De acuerdo con los fundamentos del método,  $\mathbf{G}_m$  puede ser la función de Green de cualquier medio que resulte de extender al infinito alguna de las fronteras del dominio  $m$  de la heteroestructura, con tal de que el medio infinito resultante satisfaga la misma ecuación diferencial que en el dominio  $m$ , sin importar las condiciones de contorno que finalmente determinaran a  $\mathbf{G}_m$ . En nuestro trabajo asumiremos heteroestructuras compuestas de dominios homogéneos, donde los coeficientes de (1.1) dependen de  $z$  pero son constantes por tramos. En estos casos lo más común es describir los dominios homogéneos constituyentes con funciones de Green  $\mathbf{G}_m$  que satisfacen condiciones de *regularidad* en el infinito, en el sentido causal [8, 27]:

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} \lim_{z \rightarrow \pm\infty} \mathbf{G}_m(k_\ell, z, z') = \lim_{\eta \rightarrow 0} \lim_{z \rightarrow \pm\infty} \mathbf{g}_\ell e^{\mp\eta(z-z')} e^{ik_\ell(z-z')} = \mathbf{0}_N. \quad (1.22)$$

Aquí se ha considerado que para el medio homogéneo, la función  $\mathbf{G}$  solución de la ecuación (1.17) para  $z \neq z'$  se expresa en términos de funciones del tipo  $\mathbf{g}_\ell e^{ik_\ell(z-z')}$ , donde  $k_\ell$  ( $\ell = 1, 2, \dots, 2N$ ) son los polos de primer orden de  $\mathbf{G}$  (sección 2.3) y  $\mathbf{g}_\ell$  en una matriz dependiente de  $k_\ell$ . En general estos polos pueden ser reales o complejos (sección 2.2). La condición (1.22) está expresada para valores  $k_\ell$  reales los que utilizando técnicas de continuidad analítica (formulación causal desde el punto de vista de la teoría de dispersión) fueron definidos como  $k_\ell = \lim_{\eta \rightarrow 0} (k_\ell \pm i\eta)$ .

Teniendo en cuenta la utilidad de la función de Green del medio homogéneo, establecemos como objetivo de la tesis:

#### Objetivo 1

**Obtener una expresión general y compacta para la función de Green del problema Sturm-Liouville matricial en un medio homogéneo con condiciones de regularidad en  $\pm\infty$ , así como aplicar dicha expresión a problemas físicos con  $N \geq 1$ .**

### 1.7.2 Objetivos relativos al método de la matriz de transferencia

Las variantes del método de la matriz de transferencia que proponemos en esta tesis como numéricamente estables, capaces de evadir el problema  $\Omega - d$ , han sido aplicadas con anterioridad a problemas específicos como alternativa para superar esta degradación numérica. Por lo general en problemas relacionados con la propagación de ondas elásticas en heteroestructuras y cuya ecuación de movimiento es un caso particular de la ecuación Sturm-Liouville matricial (1.1). Este es el caso de la matriz de rigidez (*stiffness matrix*, en inglés) [28, 29, 30, 31], la matriz híbrida [16, 17, 32] y la matriz de dispersión [17, 33, 34]. Sin embargo, en ningún caso se habían dado pruebas o realizado estudios analíticos de la capacidad de estas matrices para evadir el problema  $\Omega - d$  en un campo mucho más amplio de problemas, dígame la familia de problemas físicos cuyas ecuaciones de movimiento siguen el patrón Sturm-Liouville matricial.

También resulta curioso que se han estudiado poco las relaciones entre la matriz  $\mathbf{T}$  y aquellas variantes propuestas para evadir el problema  $\Omega - d$ . Sin duda alguna estas relaciones resultan una valiosa herramienta para intentar explicar porqué mientras  $\mathbf{T}$  puede manifestar dicha degradación numérica, algunas variantes directamente relacionadas con ella son numéricamente estables.

Las razones expuestas arriba nos condujeron al planteamiento de los siguientes objetivos:



### Objetivo 2

Comprobar analíticamente mediante el estudio de las relaciones entre matrices, que existen variantes del método de la matriz de transferencia, derivadas de la ecuación Sturm-Liouville matricial, capaces de evadir el problema  $\Omega - d$ .

### Objetivo 3

Resolver diferentes problemas físicos de interés cuyas ecuaciones de movimiento son casos particulares de la ecuación Sturm-Liouville matricial, utilizando matrices numéricamente estables derivadas de la ecuación maestra, y verificar que estas son capaces de evadir el problema  $\Omega - d$  que manifiesta la matriz T.

## Capítulo 2

# Función de Green del medio homogéneo

### 2.1 Introducción

En un sistema a capas el problema de empalme que se plantea en la intercara de dos medios constituyentes puede ser estudiado mediante el Método de Empalme de Funciones de Green en Superficies (SGFM) [8, 9]. Este método involucra a las funciones de Green  $\mathbf{G}_m$  de los medios masivos asociados a cada uno de los  $m$  medios constituyentes del sistema a capas. Por ejemplo considérese el problema de una intercara (que ubicamos en la coordenada  $z_s = 0$ ) donde el medio 1 a su izquierda ( $z \leq 0$ ) está empalmado a un medio 2 a su derecha ( $z \geq 0$ ). Sea  $\mathbf{G}_1/\mathbf{G}_2$  la función de Green del medio 1/2 y  $\mathbf{G}_s$  la función de Green que se obtiene para el sistema empalmado bajo estudio: medio 1 ( $z \leq 0$ )-intercara ( $z_s = 0$ )- medio 2 ( $z \geq 0$ ). Entonces si  $z$  y  $z'$  están en el mismo lado, por ejemplo en el lado izquierdo la forma de  $\mathbf{G}_s$  es:

$$\mathbf{G}_s(z, z') = \mathbf{G}_1(z, z') + \mathbf{G}_1(z, 0) \cdot \mathcal{G}_1^{-1} \cdot (\mathcal{G}_s - \mathcal{G}_1) \cdot \mathcal{G}_1^{-1} \cdot \mathbf{G}_1(0, z'), \quad (2.1)$$

y si están en lados opuestos, por ejemplo  $z'$  en el lado izquierdo y  $z$  en el lado derecho, entonces:

$$\mathbf{G}_s(z, z') = \mathbf{G}_2(z, 0) \cdot \mathcal{G}_2^{-1} \cdot \mathcal{G}_s \cdot \mathcal{G}_1^{-1} \cdot \mathbf{G}_1(0, z'). \quad (2.2)$$

Aquí  $\mathcal{G}_1$ ,  $\mathcal{G}_2$  y  $\mathcal{G}_s$  representan respectivamente la proyección de  $\mathbf{G}_1(z, z')$ ,  $\mathbf{G}_2(z, z')$  y  $\mathbf{G}_s(z, z')$  en  $z_s = 0$ . Dada  $\mathbf{G}(z, z')$  la proyección en  $z$  viene dada por  $\mathcal{G}(z) = \lim_{z' \rightarrow z} \mathbf{G}(z, z')$ .

La proyección  $\mathcal{G}_s$  se determina mediante la fórmula de empalme, el resultado principal del análisis SGFM:

$$\mathcal{G}_s^{-1} = \mathcal{A}_2^{-1} \cdot \mathcal{G}_2^{-1} - \mathcal{A}_1^{-1} \cdot \mathcal{G}_1^{-1}, \quad (2.3)$$

donde  $\mathcal{A}_2$  y  $\mathcal{A}_1$  son las proyecciones en  $z_s$  de las formas diferenciales lineales relacionadas con  $\mathbf{G}_1(z, z')$  y  $\mathbf{G}_2(z, z')$  respectivamente. Dada la  $\mathbf{G}(z, z')$ , la forma diferencial lineal relacionada es:

$$\mathbf{A}(z, z') = \mathbf{B}(z) \cdot \frac{\partial \mathbf{G}(z, z')}{\partial z} + \mathbf{P}(z) \cdot \mathbf{G}(z, z'). \quad (2.4)$$

En el formalismo SGFM,  $\mathbf{G}_m$  también puede ser la función de Green de cualquier medio extendido (m) del medio constituyente m, con la única condición de que todo medio extendido satisfaga la misma ecuación diferencial. Para introducir la definición de medio extendido y entender la importancia de este concepto en el formalismo SGFM consideremos el medio 1 del sistema empalmado que estudiamos. Para el medio 1 un medio extendido, el cual denotamos (1) es, por definición [9], un medio infinito idénticamente igual al medio 1 en el lado 1 y cualquier medio en el lado 2. Denotemos su función de Green como  $\mathbf{G}_{(1)}$  y llamémosle pseudo- $\mathbf{G}$ . Igualmente,  $\mathbf{G}_{(2)}$  es la función de Green de un medio extendido

(2) idénticamente igual a 2 en el lado 2 y un medio arbitrario en el lado izquierdo. Un teorema sobre el medio extendido [9, 35] confirma que la función de Green  $\mathbf{G}_s$  que se obtiene para el sistema empalmado es independiente del medio extendido asignado arbitrariamente a cada medio constituyente. Entonces, por conveniencia o simplicidad, podemos elegir cualquier función de Green atribuible al operador Sturm-Liouville matricial  $\mathbf{L}$  para cada capa de la heteroestructura. Lo más común es describir las capas internas de la heteroestructura mediante funciones de Green que cumplen condiciones de regularidad [8, 27] en  $\pm\infty$ . Este enfoque particularmente simple es muy natural cuando los parámetros materiales del sistema son constantes en cada capa y es una muy buena aproximación para muchos sistemas reales. Para los dominios externos L/R de la heteroestructura se deben obtener las funciones de Green que satisfagan las condiciones de contorno apropiadas en  $-\infty/+\infty$ .

Por las razones antes mencionadas a cada capa  $m$  de la heteroestructura asignamos un medio extendido que consiste en un medio homogéneo infinito, asumiendo que las matrices  $\mathbf{B}$ ,  $\mathbf{P}$ ,  $\mathbf{Y}$  y  $\mathbf{W}$  son constantes en  $(-\infty, +\infty)$ . El trabajo en esta sección estará enfocado al cálculo de la función de Green del medio homogéneo regular en  $\pm\infty$ . Es conveniente enfatizar que este estudio parte de considerar el operador  $\mathbf{L}$  formalmente hermítico [8, 27]. Ello implica, como se indicó en la sección anterior, que  $\mathbf{B} = \mathbf{B}^\dagger$ ,  $\mathbf{P} = -\mathbf{Y}^\dagger$  and  $\mathbf{W} = \mathbf{W}^\dagger$ . Sin embargo, como se verá en la sección 2.5 la forma general y compacta que se obtendrá para la función de Green del problema homogéneo también aplica a casos en que el operador  $\mathbf{L}$  deja de ser formalmente hermítico como consecuencia de considerar las pérdidas del medio.

En el medio homogéneo la ecuación maestra (1.1) para el campo  $\mathbf{F}(z)$  y la correspondiente ecuación para la función de Green toman la forma:

$$\mathbf{B} \cdot \mathbf{F}''(z) + (\mathbf{P} + \mathbf{Y}) \cdot \mathbf{F}'(z) + \mathbf{W} \cdot \mathbf{F}(z) = \mathbf{0}; \quad (2.5)$$

$$\mathbf{B} \cdot {}''\mathbf{G}(z, z') + (\mathbf{P} + \mathbf{Y}) \cdot {}'\mathbf{G}(z, z') + \mathbf{W} \cdot \mathbf{G}(z, z') = \mathbf{I} \delta(z - z'). \quad (2.6)$$

Por definición  ${}''\mathbf{G}(z, z') = \frac{\partial^2 \mathbf{G}(z, z')}{\partial z^2}$  y  ${}'\mathbf{G}(z, z') = \frac{\partial \mathbf{G}(z, z')}{\partial z}$ . A partir de la ecuación (2.6) en la sección 2.3 se obtendrá  $\mathbf{G}(z, z')$  imponiendo condiciones de regularidad en  $\pm\infty$ . Pero antes se impone el análisis del QEP que resulta de la ecuación (2.5).

## 2.2 Soluciones LI. Problema Cuadrático de Eigenvalores y sus propiedades

Las soluciones linealmente independientes (LI) del sistema diferencial (2.5) pueden ser expresadas en la forma de exponenciales [36, 37]:

$$\mathbf{F}(z) = \mathbf{F}_0 e^{ikz}. \quad (2.7)$$

Los eigenvalores  $k$  son obtenidos a partir de los ceros del determinante de la matriz secular:

$$\Delta(k) = -k^2 \mathbf{B} + ik(\mathbf{P} + \mathbf{Y}) + \mathbf{W}. \quad (2.8)$$

Si la matriz  $\mathbf{B}$  es *regular* ( $\text{Det}[\mathbf{B}] \neq 0$ ) tendremos un conjunto de eigenvalores  $K = \{k_\ell, \ell = 1, 2, \dots, 2N\}$  y las correspondientes eigenfunciones  $\mathbf{F}_\ell(z) = \mathbf{F}_{0\ell} \exp[ik_\ell z]$ ;  $N$  es el número de ecuaciones acopladas incluidas en el sistema (2.5). Las amplitudes  $\mathbf{F}_{0\ell}$  multiplicadas por una constante son obtenidas a partir del sistema de ecuaciones lineales homogéneas:

$$\Delta(k_\ell) \cdot \mathbf{F}_{0\ell} = \mathbf{0}. \quad (2.9)$$

La constante multiplicativa se define generalmente por una condición de normalización. La búsqueda de los valores de  $k_\ell$  y los vectores no nulos  $\mathbf{F}_{0\ell}$  que satisfacen (2.9) es lo que se conoce como Problema Cuadrático de Eigenvalores (QEP) [6].

Es fácil demostrar bajo las condiciones generales de hermiticidad formal del operador  $\mathbf{L}$  ( $\mathbf{B}^\dagger = \mathbf{B}$ ,  $\mathbf{W}^\dagger = \mathbf{W}$  y  $\mathbf{Y} = -\mathbf{P}^\dagger$ ) que los eigenvalores  $k_\ell$  pueden ser reales o aparecer en pares del tipo  $k_\ell$  y su

complejo conjugado  $k_\ell^*$ . Para demostrar esta propiedad general escribamos la ecuación secular para un  $k_\ell$ :

$$\text{Det} [-k_\ell^2 \mathbf{B} + ik_\ell(\mathbf{P} + \mathbf{Y}) + \mathbf{W}] = 0. \quad (2.10)$$

Si el determinante de una matriz es cero, también lo será el determinante de su transpuesta conjugada:

$$\text{Det} [-(k_\ell^*)^2 \mathbf{B}^\dagger - ik_\ell^*(\mathbf{P} + \mathbf{Y})^\dagger + \mathbf{W}^\dagger] = 0. \quad (2.11)$$

Dadas las condiciones generales de hermiticidad formal del operador  $\mathbf{L}$  tendremos que  $\mathbf{B}^\dagger = \mathbf{B}$ ,  $\mathbf{W}^\dagger = \mathbf{W}$  y  $(\mathbf{P} + \mathbf{Y})^\dagger = -(\mathbf{P} + \mathbf{Y})$  y (2.11) resulta:

$$\text{Det} [-(k_\ell^*)^2 \mathbf{B} + ik_\ell^*(\mathbf{P} + \mathbf{Y}) + \mathbf{W}] = 0. \quad (2.12)$$

Por tanto  $k_\ell^*$  también es un eigenvalor al igual que  $k_\ell$ . Esto quiere decir que los eigenvalores o son reales o están por pares del tipo:  $(k_\ell, k_\ell^*)$ . Un resumen que incluye este y otros posibles QEP se encuentra en la tabla 1.1 de [6].

Lógicamente si el término lineal  $(\mathbf{P} + \mathbf{Y})$  es nulo la ecuación secular (2.10) solo contendrá potencias pares de  $k_\ell$  y los eigenvalores aparecerán en pares del tipo  $(k_\ell, -k_\ell)$  independientemente de que sean reales o complejos. Algunos ejemplos donde  $\mathbf{P} + \mathbf{Y} = \mathbf{0}$  debido a que  $\mathbf{Y} = \mathbf{P} = \mathbf{0}$  son: Ecuación de Schrödinger [8] ( $N = 1$ ), modelo de dos canales [8] ( $N = 2$ ) y pseudopotenciales locales [8] (cualquier  $N$ ), entre otros, ver tabla 2.1. Para la generalidad de los problemas que consideramos  $\mathbf{Y} = -\mathbf{P}^\dagger$  y se tiene que  $\mathbf{P} + \mathbf{Y} = \mathbf{P} - \mathbf{P}^\dagger$ , de manera que el término lineal no estará presente si  $\mathbf{P}$  es hermítica no nula. Sin embargo, hasta donde conocemos, no existen casos en que  $\mathbf{P} + \mathbf{Y} = \mathbf{0}$  como consecuencia de que  $\mathbf{P}$  sea hermítica no nula. Los ejemplos de la tabla 2.1 donde  $\mathbf{P} \neq \mathbf{0}$  son casos en que  $\mathbf{P}$  no es hermítica. En otras áreas de la física, cuando se conoce el sistema de ecuaciones de movimiento para el medio homogéneo, la determinación de  $\mathbf{P}$  y  $\mathbf{Y}$  en el caso general de la ecuación (2.5) se obtiene por simetrización *estándar* del operador [38, 39]. Por simetrización *estándar* entendemos la sustitución del término en la primera derivada:

$$2\mathbf{P} \cdot \frac{d\mathbf{F}}{dz}$$

por

$$\mathbf{P} \cdot \frac{d\mathbf{F}}{dz} + \frac{d}{dz} (\mathbf{P} \cdot \mathbf{F}) .$$

Con tal procedimiento tenemos que  $\mathbf{Y} = \mathbf{P}$  y la matriz  $\mathbf{P}$  se convierte en antihermítica y obviamente  $(\mathbf{P} + \mathbf{Y})$  no es nulo.

El procedimiento simetrización *estándar* fue aplicado, por ejemplo, al problema de tunelaje de electrones en superredes de doble capa de grafeno en la sección 5.6 de cuya ecuación de movimiento se obtuvo la suma  $(\mathbf{P} + \mathbf{Y})$ , de manera que fue necesario obtener una expresión para  $\mathbf{P}$  que posteriormente se utilizó para calcular la forma lineal asociada al operador  $\mathbf{L}$ , ver apéndice P.

En un marco general, los problemas físicos que se tratarán en esta tesis pueden ser clasificados en dos grupos principales:  $\mathbf{P} + \mathbf{Y} = \mathbf{0}$  y  $\mathbf{P} + \mathbf{Y} \neq \mathbf{0}$ . El análisis realizado en la sección 2.4 para problemas específicos indica que los pares  $(k_\ell; -k_\ell)$  también se forman en el grupo  $\mathbf{P} + \mathbf{Y} \neq \mathbf{0}$  bajo ciertas condiciones de simetría del material que conforma los distintos dominios de la heteroestructura.

Bajo condiciones de hermiticidad formal del operador  $\mathbf{L}$  las matrices  $\mathbf{B}$ ,  $i(\mathbf{P} + \mathbf{Y}) = \mathbf{C}$  y  $\mathbf{W}$  que aparecen en el problema (2.9) son hermíticas (pueden ser reales y simétricas). Ello implica que la matriz secular  $\Delta(k)$  (2.8) es auto-adjunta ( $\Delta(k) = \Delta(k^*)^\dagger$ ) y por ende podemos aplicar la expresión (3.16) de [6] para determinar si los eigenvalores  $k_\ell$  son reales o complejos. Para el eigenvector  $\mathbf{F}_\ell(z) = \mathbf{F}_{0\ell} \exp[ik_\ell z]$  tal expresión toma la forma:

$$k_\ell = \left( -c(\mathbf{F}_\ell) \pm \sqrt{c(\mathbf{F}_\ell)^2 - 4m(\mathbf{F}_\ell) \cdot w(\mathbf{F}_\ell)} \right) / 2m(\mathbf{F}_\ell) . \quad (2.13)$$

	Problema físico	Área	$N$	$\mathbf{P}, \mathbf{Y}$	Ref.
1	SMM1	Matemáticas	1	$\mathbf{P} = \mathbf{Y} = \mathbf{0}$	
2	Modelo Ben Daniel-Duke	Física del estado sólido	1	$\mathbf{P} = \mathbf{Y} = \mathbf{0}$	[8], [7]
3	Modos acústico TH	Acústica	1	$\mathbf{P} = \mathbf{Y} = \mathbf{0}$	[41]
4	Modos ópticos TH	Física del estado sólido	1	$\mathbf{P} = \mathbf{Y} = \mathbf{0}$	[2]
5	SMM2	Matemáticas	2	$\mathbf{P} = \mathbf{Y} = \mathbf{0}$	
6	Modelo de dos canales	Física del estado sólido	2	$\mathbf{P} = \mathbf{Y} = \mathbf{0}$	[8]
7	Modos elásticos sagitales	Acústica	2	$\mathbf{P} = \mathbf{Y}^T \neq \mathbf{0}$	[9], [41]
8	Modelo de Bogolioubov	Física del estado sólido	2	$\mathbf{P} = \mathbf{Y} = \mathbf{0}$	[9]
9	EFA-2: Hamiltoniano de Dimmock	Física del estado sólido	2	$\mathbf{P} = \mathbf{Y} \neq \mathbf{0}$	[9], [8]
10	EFA-2: Kohn-Luttinger	Física del estado sólido	2	$\mathbf{P} = \mathbf{Y} \neq \mathbf{0}$	[42]
11	SMM3	Matemáticas	3	$\mathbf{P} = \mathbf{Y} = \mathbf{0}$	
12	MFC	Física del estado sólido	3	$\mathbf{P} = \mathbf{Y} \neq \mathbf{0}$	[2],[9]
13	Modos piezoeléctricos (cristal de clase 6 mm)	Física del estado sólido	3	$\mathbf{P} = \mathbf{Y} \neq \mathbf{0}$	[41],[43]
14	Modos elásticos (Casos especiales)	Física del estado sólido	3	$\mathbf{P} = \mathbf{Y} \neq \mathbf{0}$	[3],[41]
15	EFA-4: Kohn-Luttinger	Física del estado sólido	4	$\mathbf{P} = \mathbf{Y} \neq \mathbf{0}$	[10]
16	Modos magneto-electro-elásticos (cristal de clase 6 mm )	Física del estado sólido	5	$\mathbf{P} = \mathbf{Y} \neq \mathbf{0}$	[44]
17	EFA-N	Física del estado sólido	$N$	$\mathbf{P} = \mathbf{Y} \neq \mathbf{0}$	[7]
18	Pseudopotenciales Locales	Física del estado sólido	$N$	$\mathbf{P} = \mathbf{Y} = \mathbf{0}$	[9]

Tabla 2.1: SMM1, SMM2, SMM3, *Modelo matemático simple* con  $N = 1, 2, 3$ , respectivamente. TH, *transversal horizontal*. MFP, *Modelo Fenomenológico completo* para modos ópticos polares de onda larga. Casos especiales, *Material transversalmente isotrópico, material tetragonal y cúbico*. EFA, *Aproximación de la función envolvente*.

Generalmente solo uno de estos  $k_\ell$  es un eigenvalor de  $\Delta(k)$ . Aquí  $m(\mathbf{F}_\ell) = \mathbf{F}_{0\ell}^\dagger \mathbf{m} \mathbf{F}_{0\ell}$ ,  $c(\mathbf{F}_\ell) = \mathbf{F}_{0\ell}^\dagger \mathbf{C} \mathbf{F}_{0\ell}$  y  $w(\mathbf{F}_\ell) = \mathbf{F}_{0\ell}^\dagger \mathbf{W} \mathbf{F}_{0\ell}$  son las formas hermíticas [40] correspondientes a las matrices  $\mathbf{m} = -\mathbf{B}$ ,  $\mathbf{C}$ , y  $\mathbf{W}$  respectivamente; evaluadas para el eigenvector  $\mathbf{F}_\ell(z)$ . En la sección 2.3 la expresión (2.13) es utilizada para analizar si  $k_\ell$  es real o complejo en los casos  $\mathbf{P} + \mathbf{Y} = \mathbf{0}$  y  $\mathbf{P} + \mathbf{Y} \neq \mathbf{0}$  combinando los signos de  $m(\mathbf{F}_\ell)$  y  $w(\mathbf{F}_\ell)$ .

Tomando de ejemplo la forma hermítica  $m(\mathbf{F}_\ell)$ , se dice que está definida positiva si  $m(\mathbf{F}_\ell) > 0$  para todo  $\mathbf{F}_\ell$  no nulo, y  $m(0) = 0$ ;  $m(\mathbf{F}_\ell)$  está semidefinida positiva si  $m(\mathbf{F}_\ell) \geq 0$  para todo  $\mathbf{F}_\ell$ . Igualmente,  $m(\mathbf{F}_\ell)$  es definida o semidefinida negativa si  $m(\mathbf{F}_\ell) < 0$ ,  $m(\mathbf{F}_\ell) \leq 0$ , respectivamente. Si  $m(\mathbf{F}_\ell)$  puede tomar tanto valores positivos como negativos entonces se le llama indefinida.

La matriz  $\mathbf{m} = -\mathbf{B}$  al igual que  $\mathbf{C}$  y  $\mathbf{W}$  es hermítica y de orden  $N \times N$ ; por tanto tiene  $N$  eigenvalores reales. Se puede demostrar que [40]:

- $m(\mathbf{F}_\ell) > 0$  si los  $N$  eigenvalores de la matriz  $\mathbf{m}$  son positivos.
- $m(\mathbf{F}_\ell) < 0$  si los  $N$  eigenvalores de la matriz  $\mathbf{m}$  son negativos.
- $m(\mathbf{F}_\ell) \geq 0$  ( $m(\mathbf{F}_\ell) \leq 0$ ) si los  $N$  eigenvalores de la matriz  $\mathbf{m}$  son no negativos (no positivos).
- $m(\mathbf{F}_\ell)$  es indefinida si de los  $N$  eigenvalores de la matriz  $\mathbf{m}$  existe al menos un eigenvalor positivo y un eigenvalor negativo.

Las definiciones y afirmaciones enunciadas para la forma hermítica  $m(\mathbf{F}_\ell)$  también aplican a  $c(\mathbf{F}_\ell)$  y  $w(\mathbf{F}_\ell)$ .

## 2.3 Forma general y compacta de la función de Green del operador Sturm-Liouville matricial homogéneo con condiciones de regularidad en el infinito

Como se indicó en la sección anterior, en el marco de los problemas que tratamos los eigenvalores pueden ser reales o aparecer en pares del tipo  $(k_\ell, k_\ell^*)$  e incluso pueden formarse pares del tipo  $(k_\ell, -k_\ell)$  en ambos casos, situación común en los problemas que hemos analizado. En todos los casos, los eigenvalores  $k_\ell$  quedan envaluados en términos de una variable autovalor que eventualmente aparece en los coeficientes matriciales del sistema Sturm-Liouville matricial. Por ejemplo, cuando trabajamos con Hamiltonianos esta variable autovalor es la energía  $E$  de los estados, en problemas de ondas elásticas la variable autovalor es  $\omega^2$ , la frecuencia de los modos al cuadrado. Denotemos con  $\Omega$  cualquiera de estas variables. Desde el punto de vista causal de la teoría de dispersión, se pueden utilizar técnicas de continuidad analítica y definir los valores reales de  $\Omega$  como:

$$\Omega = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (\Omega + i\varepsilon). \quad (2.14)$$

Entonces al evaluar en  $\Omega + i\varepsilon$ , con  $\varepsilon$  arbitrariamente pequeño, estos pasarán a ser complejos y se ubicarán en uno de los semiplanos (superior o inferior) del plano complejo. La técnica que acaba de describirse forma parte del procedimiento que se aplica para imponer condiciones de *regularidad* en  $\pm\infty$  [8, 27]. Si además, los eigenvalores forman pares del tipo  $(k_\ell, -k_\ell)$  tendremos que uno de ellos resultará con parte imaginaria positiva y el otro con parte imaginaria negativa. Por todo lo anterior podemos considerar que los eigenvalores  $k_\ell$  en general son complejos e introducir los conjuntos  $K_\uparrow$  y  $K_\downarrow$  para incluir los eigenvalores con parte imaginaria positiva y negativa respectivamente.

Regresando a la ecuación (2.6), por medio del método estándar de Fourier [36, 37] se obtiene que (apéndice A):

$$\mathbf{G}(z, z') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{\Delta}(k)^{-1} e^{ik(z-z')} dk. \quad (2.15)$$

La integración anterior puede realizarse mediante cálculo de residuos y aplicando el *lema de Jordan* [45]. En este caso, dicho lema impone no solo la condición de que la función  $\mathbf{\Delta}(k)^{-1} e^{ik(z-z')}$  sea analítica en su dominio (excepto en sus polos) sino que también  $\mathbf{\Delta}(k)^{-1}$  tienda a cero uniformemente con respecto al argumento de la variable compleja  $k$  cuando  $|k| \rightarrow \infty$  [45]. Para demostrar esta última condición, utilizaremos la expresión:

$$\mathbf{\Delta}(k)^{-1} = \frac{\mathbf{C}_o^T(k)}{\text{Det} [\mathbf{\Delta}(k)]}, \quad (2.16)$$

donde  $\mathbf{C}_o(k)$  es la matriz de cofactores de la matriz secular  $\mathbf{\Delta}(k)$ , y  $\mathbf{C}_o^T(k)$  representa su transpuesta. El denominador  $\text{Det} [\mathbf{\Delta}(k)]$  es el determinante de  $\mathbf{\Delta}(k)$  y puede ser expresado como  $\text{Det} [\mathbf{\Delta}(k)] = \text{Det} [\mathbf{B}]k^{2N} + \text{términos de orden inferior}$ . Por tanto, si la matriz  $\mathbf{B}$  es regular ( $\text{Det} [\mathbf{B}] \neq 0$ ), el término con el mayor exponente de  $k$  en el polinomio secular es  $\text{Det} [\mathbf{B}]k^{2N}$ . Mientras tanto, el término de mayor exponente de  $k$  que puede aparecer en cualquier elemento matricial de  $\mathbf{C}_o^T$  tiene la forma  $p \cdot k^{2N-2}$ ,  $p$  es solo un factor diferente de cero. Expresando  $k = |k| e^{i\theta}$ ,  $0 \leq \theta \leq 2\pi$  se tiene que:

$$\lim_{|k| \rightarrow \infty} [\mathbf{\Delta}(k)^{-1}]_{ls} = \lim_{|k| \rightarrow \infty} \frac{p \cdot (|k| e^{i\theta})^{2N-2}}{\text{Det} [\mathbf{B}] \cdot (|k| e^{i\theta})^{2N}} = \lim_{|k| \rightarrow \infty} \frac{p}{\text{Det} [\mathbf{B}] |k|^2 e^{i2\theta}} = 0. \quad (2.17)$$

Por tanto, cada elemento matricial  $[\mathbf{\Delta}(k)^{-1}]_{ls}$ ,  $(l, s = 1, \dots, N)$  satisface la condición anterior para los casos de nuestro interés:  $(\text{Det} [\mathbf{B}] \neq 0)$ .

Regresando a la integración (2.15), no perdemos generalidad si asumimos que  $\mathbf{\Delta}(k)^{-1}$  tiene polos de primer orden. Entonces la expresión para  $\mathbf{G}(z, z')$  depende fuertemente de la distribución de los eigenvalores  $k_\ell$  en el plano complejo. El resultado general es (apéndice A):

$$\mathbf{G}(z, z') = \begin{cases} \sum_{k_\ell \in K_\uparrow} \mathbf{g}_\ell e^{ik_\ell|z-z'|} & z > z' \\ -\sum_{k_\ell \in K_\downarrow} \mathbf{g}_\ell e^{-ik_\ell|z-z'|} & z < z' \end{cases}, \quad (2.18)$$

y la matriz  $\mathbf{g}_\ell$  depende solamente de  $k_\ell$ :

$$\mathbf{g}_\ell = i \frac{\mathbf{C}_o^T(k_\ell)}{D'(k_\ell)}. \quad (2.19)$$

El término  $D'(k)$  es un polinomio que resulta de la diferenciación del polinomio secular  $\text{Det} [\mathbf{\Delta}(k)]$  con respecto a  $k$ .

### 2.3.1 Caso $\mathbf{P} + \mathbf{Y} = \mathbf{0}$

Para los casos  $\mathbf{P} + \mathbf{Y} = \mathbf{0}$  la expresión general (2.18) puede ser escrita como:

$$\mathbf{G}(z, z') = \sum_{k_\ell \in K_\uparrow} \mathbf{g}_\ell e^{ik_\ell|z-z'|}. \quad (2.20)$$

Esta simplificación es consecuencia de la formación de pares del tipo  $(k_\ell; -k_\ell)$ . En efecto, cuando  $\mathbf{P} + \mathbf{Y} = \mathbf{0}$ , el polinomio secular contiene solo términos con exponentes pares de  $k$ , por lo que tanto  $k_\ell$  como  $-k_\ell$  son eigenvalores del problema. Entonces por cada  $k_\ell \in K_\uparrow$  habrá un  $k_\ell \in K_\downarrow$  igual en módulo pero con signo opuesto. En adición a esto la matriz  $\mathbf{C}_o^T(k_\ell)$  contendrá solo exponentes pares de  $k_\ell$  mientras que el polinomio  $D'(k_\ell)$  se compone solo de términos con exponentes impares de  $k_\ell$ . Como resultado la expresión de  $\mathbf{G}(z, z')$  (2.18) para  $z > z'$  va a ser la misma que para  $z < z'$ .

Utilizando la expresión (2.13), es posible realizar el siguiente análisis sobre los pares  $(k_\ell; -k_\ell)$  considerando  $\mathbf{P} + \mathbf{Y} = \mathbf{0}$  ( $\mathbf{C} = \mathbf{0}$ ):

$$\text{Si } m(\mathbf{F}_\ell) < 0 \text{ y } \begin{cases} w(\mathbf{F}_\ell) > 0; & \text{pares de números reales;} \\ w(\mathbf{F}_\ell) < 0; & \text{pares de números imaginarios puros.} \end{cases} \quad (2.21)$$

y

$$\text{Si } m(\mathbf{F}_\ell) > 0 \text{ y } \begin{cases} w(\mathbf{F}_\ell) < 0; & \text{pares de números reales;} \\ w(\mathbf{F}_\ell) > 0; & \text{pares de números imaginarios puros.} \end{cases} \quad (2.22)$$

Cuando  $m(\mathbf{F}_\ell)$  o  $w(\mathbf{F}_\ell)$  es indefinida los pares pueden ser reales, imaginarios puros o una combinación de ambos. En este caso se pueden utilizar las expresiones de los eigenvalores para determinar si son reales o imaginarios puros.

### 2.3.2 Caso $\mathbf{P} + \mathbf{Y} \neq \mathbf{0}$

Como se indicó en la sección anterior la formación de pares del tipo  $(k_\ell, -k_\ell)$  es una situación común en los problemas que hemos analizado, aun en el caso  $\mathbf{P} + \mathbf{Y} \neq \mathbf{0}$ . Por ejemplo, cuando  $\mathbf{B}$  y  $\mathbf{W}$  son simétricas y  $(\mathbf{P} + \mathbf{Y})^T = -(\mathbf{P} + \mathbf{Y})$  (antisimétrica), es fácil demostrar, siguiendo un procedimiento análogo al descrito en (2.10)-(2.12), que el resultado es  $(k_\ell; -k_\ell) \in K$ . Este es el caso de los modelos: EFA-2 Hamiltoniano de Dimmock y EFA-2 Kohn-Luttinger listados en la tabla 2.1. En adición a esto, en la sección 2.4 se verá que la simetría del material que conforma los distintos dominios de la heteroestructura está estrechamente relacionada con la formación de pares del tipo  $(k_\ell, -k_\ell)$ .

Entonces considerando la formación de pares  $(k_\ell, -k_\ell)$  en los problemas del grupo  $\mathbf{P} + \mathbf{Y} \neq \mathbf{0}$  la ecuación general (2.18) admite la siguiente simplificación:

$$\mathbf{G}(z, z') = \sum_{k_\ell \in K_\uparrow} i \frac{\mathbf{C}_o^T(\text{sgn}(z - z') \cdot k_\ell)}{D'(k_\ell)} e^{ik_\ell|z - z'|}. \quad (2.23)$$

Se introdujo la función *signo* (sgn) porque ahora la matriz de cofactores  $\mathbf{C}_o$  puede contener tanto exponentes pares como impares de  $k_\ell$ . Como es de esperar, el polinomio  $D'(k_\ell)$  se compone solo de términos con exponentes impares de  $k_\ell$ .

En este caso también es posible decir algo acerca de si los pares  $(k_\ell; -k_\ell)$  son reales o complejos. A partir de la expresión (2.13), considerando  $\mathbf{P} + \mathbf{Y} \neq \mathbf{0}$ , tendremos pares de números reales si:

$$m(\mathbf{F}_\ell) < 0 \text{ y } w(\mathbf{F}_\ell) > 0 \quad \text{o} \quad m(\mathbf{F}_\ell) > 0 \text{ y } w(\mathbf{F}_\ell) < 0 \quad (2.24)$$

El cualquier otro caso los pares pueden ser reales, complejos o podemos tener combinaciones de pares reales y complejos.

Como veremos la forma hermítica  $c(\mathbf{F}_\ell)$  resulta indefinida para todos los problemas  $\mathbf{P} + \mathbf{Y} \neq \mathbf{0}$  analizados. Es posible demostrar, considerando  $m(\mathbf{F}_\ell)$  definida, que la indefinición de  $c(\mathbf{F}_\ell)$  es una condición necesaria para obtener pares del tipo  $(k_\ell; -k_\ell)$ . Supongamos eigenvalores complejos con parte real no nula. Si los eigenvalores son imaginarios puros la propiedad  $(k_\ell; -k_\ell)$  es consecuencia directa de la propiedad general  $(k_\ell; k_\ell^*)$ . En el siguiente análisis consideramos  $N \geq 1$ . Partamos de la expresión:

$$k_\ell = \left( -c(\mathbf{F}_\ell) \pm \sqrt{c(\mathbf{F}_\ell)^2 - 4m(\mathbf{F}_\ell) \cdot w(\mathbf{F}_\ell)} \right) / 2m(\mathbf{F}_\ell). \quad (2.25)$$

De manera que, si los eigenvalores forman pares del tipo  $(k_\ell; -k_\ell)$  entonces habrá un eigenvalor  $k_i \in K$ ,  $i \neq \ell$ , tal que  $k_i = -k_\ell$ . Como  $k_i$  viene dado por uno de los valores:

$$k_i = \left( -c(\mathbf{F}_i) \pm \sqrt{c(\mathbf{F}_i)^2 - 4m(\mathbf{F}_i) \cdot w(\mathbf{F}_i)} \right) / 2m(\mathbf{F}_i), \quad (2.26)$$

entonces la relación  $k_i = -k_\ell$  implica que sus respectivas partes reales serán opuestas. Si suponemos que  $m(\mathbf{F}_\ell)$  está definida, entonces  $c(\mathbf{F}_i)$  y  $c(\mathbf{F}_\ell)$  tendrán signos opuestos y por tanto la forma hermítica  $c(\mathbf{F}_\ell)$  resulta indefinida.

Como se indicó en la sección 2.3 los eigenvalores reales pueden ser convertidos en complejos mediante un procedimiento analítico que adiciona una parte imaginaria arbitrariamente pequeña al eigenvalor  $\Omega$ . Entonces considerando que el razonamiento anterior aplica a los nuevos pares de números complejos, se puede concluir que la forma hermítica  $c(\mathbf{F}_\ell)$  también debe estar indefinida para el par inicialmente real. Decimos que es una condición necesaria debido a que, matemáticamente hablando, es posible construir un contra ejemplo que consista en una matriz secular  $\Delta(k)$  con  $c(\mathbf{F}_\ell)$  indefinida para la que los eigenvalores no aparecen en pares del tipo  $(k_\ell; -k_\ell)$ .



Por otro lado, se sabe que la suma de los  $N$  eigenvalores de una matriz cuadrada de orden  $N \times N$  es igual a la traza de la matriz. La matriz hermitica  $\mathbf{C}$  tiene  $N$  eigenvalores reales, luego si su traza ( $\text{Tr}[\mathbf{C}]$ ) es nula, ello significa que al menos dos de sus eigenvalores tendrán signo opuesto y por tanto  $c(\mathbf{F}_\ell)$  será indefinida. La propiedad ( $\text{Tr}[\mathbf{C}] = 0$ ) es una condición suficiente para que  $c(\mathbf{F}_\ell)$  sea indefinida y está presente en todos los problemas de esta tesis donde los eigenvalores aparecen por pares del tipo  $(k_\ell; -k_\ell)$ .

### 2.3.3 Expresión para verificar la validez de las funciones $\mathbf{G}(z, z')$

Una función de Green válida tiene que satisfacer la ecuación (2.6). Pero la verificación de  $\mathbf{G}(z, z')$  puede ser más sencilla si se utiliza, por ejemplo, una ecuación algebraica. Para obtener dicha ecuación reescribamos (2.6) como sigue:

$$\frac{d}{dz} \left[ \mathbf{B} \cdot \frac{d\mathbf{G}(z, z')}{dz} + \mathbf{P} \cdot \mathbf{G}(z, z') \right] + \mathbf{Y} \cdot \frac{d\mathbf{G}(z, z')}{dz} + \mathbf{W} \cdot \mathbf{G}(z, z') = \mathbf{I} \delta(z - z'). \quad (2.27)$$

A partir de esta expresión definimos la forma lineal  $\tilde{\mathbf{A}}(z, z')$ , dígase:

$$\tilde{\mathbf{A}}(z, z') = \mathbf{B} \cdot \frac{d\mathbf{G}(z, z')}{dz} + \mathbf{P} \cdot \mathbf{G}(z, z'). \quad (2.28)$$

Entonces integrando (2.27) de  $z = z' - 0$  a  $z = z' + 0$  se obtiene la condición de salto para la forma diferencial lineal  $\tilde{\mathbf{A}}(z, z')$  [9]. Esto es, a diferencia de  $\mathbf{G}(z, z')$  la forma  $\tilde{\mathbf{A}}(z, z')$  muestra un salto cuando  $z \rightarrow z'$ :

$$\mathcal{A}(z' + 0) - \mathcal{A}(z' - 0) = \mathbf{I}_N, \quad (2.29)$$

donde

$$\mathcal{A}(z' \pm 0) = \lim_{z \rightarrow z' \pm 0} \mathbf{A}(z, z'). \quad (2.30)$$

Entonces, con ayuda de (2.29), y utilizando (2.28) y (2.18) se obtiene:

$$\sum_{k_\ell \in K_\uparrow} k_\ell \cdot \mathbf{g}_\ell + \sum_{k_\ell \in K_\downarrow} k_\ell \cdot \mathbf{g}_\ell = -i \mathbf{B}^{-1}. \quad (2.31)$$

Claramente esta expresión algebraica es más conveniente que (2.6) para verificar la validez de las funciones  $\mathbf{G}(z, z')$  obtenidas.

Para los casos  $\mathbf{P} + \mathbf{Y} = \mathbf{0}$  ( $\mathbf{C} = \mathbf{0}$ ), la expresión (2.31) se simplifica resultando:

$$\sum_{k_\ell \in K_\uparrow} k_\ell \cdot \mathbf{g}_\ell = -\frac{i}{2} \mathbf{B}^{-1}. \quad (2.32)$$

Para los casos  $\mathbf{P} + \mathbf{Y} \neq \mathbf{0}$  ( $\mathbf{C} \neq \mathbf{0}$ ), considerando la formación de pares del tipo  $(k_\ell; -k_\ell)$ , la expresión (2.31) se simplifica resultando:

$$\sum_{k_\ell \in K_\uparrow} k_\ell \cdot \left[ \frac{\mathbf{C}_o^{T(par)}(k_\ell)}{D'(k_\ell)} \right] = -\frac{\mathbf{B}^{-1}}{2}. \quad (2.33)$$

Para obtener esta expresión se consideró que la matriz de cofactores  $\mathbf{C}_o^T$  puede contener tanto potencias pares como impares de  $k_\ell$  en sus elementos matriciales y por tanto esta puede ser expresada como la suma de dos matrices, la primera de las cuales  $\mathbf{C}_o^{T(par)}$  contiene las potencias pares de  $k_\ell$  así como los términos independientes de  $k_\ell$ . La segunda matriz  $\mathbf{C}_o^{T(impar)}$  se compone de las potencias impares de  $k_\ell$  y de elementos matriciales nulos.

## 2.4 Funciones $\mathbf{G}(z, z')$ de casos particulares de interés

En esta sección aplicaremos la expresión obtenida para la función de Green del operador  $\mathbf{L}$  homogéneo, regular en el infinito, a diferentes problemas físicos de interés, concretamente, problemas listados en la tabla 2.1. Teniendo en cuenta que en dichos problemas los eigenvalores forman pares del tipo  $(k_\ell, -k_\ell)$  utilizaremos las dos simplificaciones que admite la forma general en los casos  $\mathbf{P} + \mathbf{Y} = \mathbf{0}$  (2.20) y  $\mathbf{P} + \mathbf{Y} \neq \mathbf{0}$  (2.23).

Mediante SMM1, SMM2 y SMM3 denotamos un Modelo Matemático Simple con  $N = 1, 2, 3$  respectivamente. Sin referencia explícita a un modelo o situación física en particular, estos modelos facilitan el cálculo de  $\mathbf{G}(z, z')$  utilizando diferentes enfoques [9] y constituyen una herramienta adicional para verificar la expresión general (2.18) en el caso  $\mathbf{P} + \mathbf{Y} = \mathbf{0}$ . Para  $N = 1$  el modelo SMM1 se define mediante las ecuaciones:

$$F''(z) + \Omega F(z) = 0; \quad (2.34)$$

$${}''G(z, z') + \Omega G(z, z') = \delta(z - z'). \quad (2.35)$$

De igual forma SMM2 ( $N = 2$ ) se define mediante las ecuaciones:

$$\mathbf{B} \cdot \mathbf{F}''(z) + \mathbf{W} \cdot \mathbf{F}(z) = \mathbf{0}; \quad (2.36)$$

$$\mathbf{B} \cdot {}''\mathbf{G}(z, z') + \mathbf{W} \cdot \mathbf{G}(z, z') = \mathbf{I}\delta(z - z'); \quad (2.37)$$

con

$$\mathbf{B} = \mathbf{I}; \mathbf{P} = \mathbf{Y} = \mathbf{0}; \mathbf{W} = \begin{pmatrix} \Omega & d \\ d & \Omega \end{pmatrix}. \quad (2.38)$$

Finalmente, las ecuaciones para SMM3 ( $N = 3$ ) son:

$$\mathbf{B} \cdot \mathbf{F}''(z) + \mathbf{W} \cdot \mathbf{F}(z) = \mathbf{0}; \quad (2.39)$$

$$\mathbf{B} \cdot {}''\mathbf{G}(z, z') + \mathbf{W} \cdot \mathbf{G}(z, z') = \mathbf{I}\delta(z - z'), \quad (2.40)$$

con:

$$\mathbf{B} = \mathbf{I}; \mathbf{P} = \mathbf{Y} = \mathbf{0}; \mathbf{W} = \begin{pmatrix} \Omega & d & 0 \\ d & \Omega & d \\ 0 & d & \Omega \end{pmatrix}. \quad (2.41)$$

Como se indicó antes,  $\Omega$  es una variable que representa un eigenvalor. En los modelos SMM2 y SMM3,  $d$  denota un parámetro válido solo para dichos modelos. Por ejemplo, si comparamos (2.34) con la ecuación de Schrödinger unidimensional, con potencial  $V(z) = 0$ , vemos que  $\Omega = \frac{2m}{\hbar^2}E$ , siendo  $E$  la energía. El modelo SMM puede generalizarse para cualquier  $N$  en cuyo caso la matriz  $\mathbf{W}$  toma la forma de una matriz de banda.

### 2.4.1 Problemas con $N = 1$

Para  $N = 1$ , por ejemplo las excitaciones elementales listadas en la tabla 2.1, los coeficientes matriciales de (2.5) y por tanto la matriz secular  $\mathbf{\Delta}(k)$  se convierten en escalares. Denotando  $\mathbf{B} = b$  y  $\mathbf{W} = w$  tendremos que  $\mathbf{\Delta}(k)^{-1} = (-k^2b + w)^{-1}$  y la expresión (2.20) se reduce a:

$$G(z, z') = -\frac{i}{2bk} e^{ik|z-z'|}, \quad (2.42)$$

donde  $k = +\sqrt{\frac{w}{b}}$ .

Si aplicamos esta expresión a la ecuación (2.34) del SMM1 se obtiene que:

$$G(z, z') = -\frac{i}{2k} e^{ik|z-z'|}; k = \sqrt{\Omega}. \quad (2.43)$$

A este resultado también se llega resolviendo (2.35) por otras vías de cálculo [9], considerando la condición de salto en la primera derivada de  $G(z, z')$  y la condición de regularidad en el infinito. Para aplicar esta última condición la variable  $\Omega$  debe entenderse en el sentido de (2.14).

### Modelo Ben Daniel-Duke

Este es el modelo de masa efectiva más simple utilizado para determinar niveles de energía en heteroestructuras [1, 46], y funciona cualitativamente para los estados más básicos de la banda de conducción en heteroestructuras de GaAs-Ga(Al)As donde el espesor de las capas de GaAs es superior a  $\sim 100$  Å y para los niveles de huecos pesados con  $\vec{\kappa}_\perp = (\kappa_x, \kappa_y) = 0$  en cualquier heteroestructura [1, 7]. Esto equivale a suponer que la función envolvente de la heteroestructura se construye a partir de estados cuánticos que pertenecen a una sola banda parabólica del material constituyente.

Sea una heteroestructura periódica cuya celda unitaria está constituida de dos capas, una de material A y la otra de material B. Sea  $m_A(m_B)$  la masa efectiva en la capa A(B). Considérese una banda de conducción isotrópica. Denotemos con  $\varepsilon_0(A)$  ( $\varepsilon_0(B)$ ) la energía del borde de dicha banda en el centro de la zona de Brillouin en el material A (B). La ecuación para la función envolvente  $f(z)$  de la heteroestructura será [1]:

$$\left[ \varepsilon_0(A) + V(z) - \frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m^*(z)} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\hbar^2 \kappa_\perp^2}{2m^*(z)} \right] f(z) = E f(z), \quad (2.44)$$

donde :

$$m^*(z) = \begin{cases} m_A; & \text{Si } z \text{ corresponde a la capa A;} \\ m_B; & \text{Si } z \text{ corresponde a la capa B.} \end{cases}$$

$$V(z) = \begin{cases} 0; & \text{Si } z \text{ corresponde a la capa A;} \\ \varepsilon_0(B) - \varepsilon_0(A); & \text{Si } z \text{ corresponde a la capa B.} \end{cases}$$

De acuerdo con la notación utilizada en (2.42), para la capa homogénea A tendremos que:

$$b = -\frac{\hbar^2}{2m_A}; \quad (2.45)$$

$$w = \varepsilon_0(A) + \frac{\hbar^2 \kappa_\perp^2}{2m_A} - E, \quad (2.46)$$

y el eigenvalor  $k$  viene dado por:

$$k = +\sqrt{\frac{2m_A}{\hbar^2} \left( E - \varepsilon_0(A) - \frac{\hbar^2 \kappa_\perp^2}{2m_A} \right)}. \quad (2.47)$$

Para la capa homogénea B tendremos que:

$$b = -\frac{\hbar^2}{2m_B}; \quad (2.48)$$

$$w = \varepsilon_0(B) + \frac{\hbar^2 \kappa_{\perp}^2}{2m_B} - E, \quad (2.49)$$

y el eigenvalor  $k$  viene dado por:

$$k = +\sqrt{\frac{2m_B}{\hbar^2} \left( E - \varepsilon_0(B) - \frac{\hbar^2 \kappa_{\perp}^2}{2m_B} \right)}. \quad (2.50)$$

### Modos acústicos transversales horizontales (TH)

En el problema 3 de la tabla 2.1 tratamos con ondas elásticas transversales. La amplitud del campo  $\mathbf{F}(z)$  es  $u_x(z)$  la cual depende de la frecuencia  $\omega$ . Para cristales isotrópicos o con simetría exagonal/ tetragonal donde el eje principal está orientado en la dirección  $x$ , tendremos una onda TH polarizada a lo largo de dicho eje, que se propaga en el plano  $yz$ . La ecuación de movimiento para esta onda es:

$$c_{44} \frac{d^2 u_x}{dz^2} + (\rho \omega^2 - c_{44} \kappa_y^2) u_x = 0, \quad (2.51)$$

donde  $c_{44}$  es el elemento correspondiente del tensor de rigidez y  $\rho$  la densidad de masa del material. Si el material es isotrópico  $c_{44} = \mu$ , una constante de Lamé. Para este caso la expresión (2.42) resulta:

$$G(z, z') = -\frac{i}{2 c_{44} q_T} e^{iq_T |z-z'|}; \quad (2.52)$$

$$q_T = +\sqrt{\left(\frac{\omega}{v_T}\right)^2 - \kappa_y^2}; \quad v_T = \sqrt{\frac{c_{44}}{\rho}} \quad (2.53)$$

### Modos ópticos transversales horizontales (TH)

El problema 4 de la tabla 2.1 es similar al 3, pero en este caso el modelo solo describe modos (elásticos) ópticos. Se trata de un modelo fenomenológico en aproximación de onda larga que describe el acoplamiento entre la amplitud de vibración  $\vec{u} = (u_x, u_y, u_z)^T$  de los modos ópticos polares y el potencial electrostático  $\varphi$  en heteroestructuras semiconductoras. Las ecuaciones de movimiento del modelo conducen a cuatro ecuaciones diferenciales parciales de segundo orden acopladas para las magnitudes  $(u_x, u_y, u_z)$  y  $\varphi$  (apéndice B). Pero en un medio isotrópico, tenemos invarianza rotacional total en el plano  $(x, y)$  de las intercaras y por ello podemos seleccionar el vector de onda  $\kappa$  en la dirección  $y$ ,  $\kappa = (0, \kappa_y)$ . En consecuencia tendremos un modo transversal horizontal  $u_x$  que se desacopla del resto [2]. La ecuación de movimiento que obtuvimos para este modo óptico TH puede escribirse así:

$$\rho(\beta_L^2 + \beta_T^2) \frac{d^2 u_x}{dz^2} + \rho[(\omega_T^2 - \omega^2) - (\beta_L^2 + \beta_T^2) \kappa_y^2] u_x = 0. \quad (2.54)$$

Para este caso la expresión (2.42) resulta:

$$G(z, z') = -\frac{i}{2 \rho(\beta_L^2 + \beta_T^2) k_H} e^{ik_H |z-z'|}; \quad (2.55)$$

$$k_H = +\sqrt{\frac{\omega_T^2 - \omega^2}{\beta_L^2 + \beta_T^2} - \kappa_y^2}. \quad (2.56)$$

Como es usual  $\omega_T$  denota la frecuencia del modo óptico transversal en el punto  $\Gamma$  de la zona de Brillouin. Los parámetros de parabolicidad  $\beta_L, \beta_T$  caracterizan las ramas ópticas del espectro de fonones en la vecindad del punto  $\Gamma$ , donde una buena aproximación para la relación de dispersión de ondas largas es [2]:

$$\omega_t^2 = \omega_T^2 - \beta_T^2 k^2; \quad \omega_l^2 = \omega_L^2 - \beta_L^2 k^2;$$

$\omega_L$  denota la frecuencia del modo óptico longitudinal en el centro de la zona de Brillouin;  $k$  es el vector de onda y está restringido a la primera zona de Brillouin.

## 2.4.2 Problemas con $N = 2$

Antes de analizar problemas físicos de interés con  $N = 2$ , se muestran los resultados de una sencilla comprobación. La expresión (2.20) fue aplicada al modelo matemático SMM2 (2.36)-(2.37) resultando:

$$\mathbf{G}(z, z') = -\frac{i}{4} \left\{ \frac{1}{q_1} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} e^{iq_1|z-z'|} + \frac{1}{q_2} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} e^{iq_2|z-z'|} \right\}, \quad (2.57)$$

donde  $q_1 = +\sqrt{\Omega+d}$  y  $q_2 = +\sqrt{\Omega-d}$ . Se puede comprobar que la expresión (2.57) es exactamente igual a la expresión (1.63) obtenida en [9] para este modelo utilizando diferentes enfoques, entre los que destaca el cálculo de  $\mathbf{G}(z, z')$  a partir de su representación espectral.

### Modos elásticos sagitales

Considérese un medio isotrópico con coeficientes de Lamé  $\lambda$  y  $\mu$ . Después de aplicar la transformada de Fourier a la ecuación de movimiento de la onda elástica se obtiene un sistema de tres ecuaciones diferenciales de segundo orden acopladas para las componentes  $u_x, u_y$  y  $u_z$  del desplazamiento de un punto arbitrario en el sólido (apéndice M). Como el medio es isotrópico el vector de onda  $\vec{\kappa}$  puede seleccionarse en la forma  $\vec{\kappa} = (0, \kappa_y)$  y el sistema de tres ecuaciones diferenciales acopladas se desacopla en una ecuación para la onda transversal horizontal (sección 2.4.1) y en un sistema de dos ecuaciones diferenciales acopladas que describe el movimiento de la onda elástica sagital cuyas amplitudes acopladas son  $u_y$  y  $u_z$ . Este es el problema 7 de la tabla 2.1. Del procedimiento descrito resulta:

$$\mu \frac{d^2 u_y}{dz^2} + i\kappa_y(\lambda + \mu) \frac{du_z}{dz} + (\rho\omega^2 - \Gamma\kappa_y^2) u_y = 0; \quad (2.58)$$

$$\Gamma \frac{d^2 u_z}{dz^2} + i\kappa_y(\mu + \lambda) \frac{du_y}{dz} + (\rho\omega^2 - \mu\kappa_y^2) u_z = 0, \quad (2.59)$$

donde  $\Gamma = \lambda + 2\mu$  y  $\omega$  la frecuencia de los modos. Este sistema de ecuaciones puede ser llevado a la forma Sturm-Liouville matricial:

$$\mathbf{B} \cdot \frac{d^2 \mathbf{F}(z)}{dz^2} + (\mathbf{P} + \mathbf{Y}) \cdot \frac{d\mathbf{F}(z)}{dz} + \mathbf{W} \cdot \mathbf{F}(z) = \mathbf{0}, \quad (2.60)$$

donde el campo  $\mathbf{F}(z)$  se conforma de las componentes del desplazamiento  $u_y(z)$  y  $u_z(z)$ :

$$\mathbf{F}(z) = \begin{bmatrix} u_y(z) \\ u_z(z) \end{bmatrix}, \quad (2.61)$$

y los coeficientes matriciales son:

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} \mu & 0 \\ 0 & \Gamma \end{pmatrix}; \quad \mathbf{P} = i \begin{pmatrix} 0 & \kappa_y \mu \\ \kappa_y \lambda & 0 \end{pmatrix}; \quad (2.62)$$

$$\mathbf{Y} = i \begin{pmatrix} 0 & \kappa_y \lambda \\ \kappa_y \mu & 0 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{W} = \begin{pmatrix} \Gamma q_L^2 & 0 \\ 0 & \mu q_T^2 \end{pmatrix};$$

$$q_L = +\sqrt{\left(\frac{\omega}{v_L}\right)^2 - \kappa_y^2}; \quad v_L = \sqrt{\frac{\Gamma}{\rho}}; \quad (2.63)$$

$$q_T = +\sqrt{\left(\frac{\omega}{v_T}\right)^2 - \kappa_y^2}; \quad v_T = \sqrt{\frac{\mu}{\rho}}. \quad (2.64)$$

Aquí  $v_L$  y  $v_T$  denotan la velocidad de las ondas longitudinales y transversales respectivamente.

De la ecuación secular  $\text{Det} [-k_\ell^2 \mathbf{B} + ik_\ell(\mathbf{P} + \mathbf{Y}) + \mathbf{W}] = 0$ , se obtuvieron los eigenvalores del QEP (sección 2.2):  $k_1 = +q_L$ ,  $k_2 = -q_L$ ,  $k_3 = +q_T$ ,  $k_4 = -q_T$ .

La función de Green obtenida a partir de la expresión (2.23) resulta:

$$\mathbf{G}(z, z') = -i \frac{\kappa_y}{2\rho\omega^2} \left[ \frac{\kappa_y}{q_L} \mathbf{G}_L(z, z') e^{iq_L|z-z'|} + \frac{q_T}{\kappa_y} \mathbf{G}_T(z, z') e^{iq_T|z-z'|} \right]; \quad (2.65)$$

$$\mathbf{G}_L(z, z') = \begin{vmatrix} 1 & \frac{q_L}{\kappa_y} \text{sgn}(z - z') \\ \frac{q_L}{\kappa_y} \text{sgn}(z - z') & q_L^2 / \kappa_y^2 \end{vmatrix}; \quad (2.66)$$

$$\mathbf{G}_T(z, z') = \begin{vmatrix} 1 & -\frac{\kappa_y}{q_T} \text{sgn}(z - z') \\ -\frac{\kappa_y}{q_T} \text{sgn}(z - z') & \kappa_y^2 / q_T^2 \end{vmatrix}. \quad (2.67)$$

El cumplimiento de (2.33) puede verificarse haciendo uso de la matriz:

$$\mathbf{C}_o^{T(par)}(k_\ell) = \begin{pmatrix} -k_\ell^2 \Gamma + \mu q_T^2 & 0 \\ 0 & -k_\ell^2 \mu + \Gamma q_L^2 \end{pmatrix}; \quad k_1 = q_L, \quad k_3 = q_T, \quad (2.68)$$

y de las expresiones:  $D'(q_L) = -2q_L(\Gamma - \mu)\rho\omega^2$  y  $D'(q_T) = 2q_T(\Gamma - \mu)\rho\omega^2$ .

Nótese que  $(\text{Tr}[\mathbf{C}]) = 0$  por lo que  $\mathbf{C}$  es indefinida y, los eigenvalores aparecen por pares del tipo  $(k_\ell; -k_\ell)$ .

De acuerdo con los valores de las constantes elásticas dados en la tabla 3.10 de [41] para diferentes cristales isotrópicos, los coeficientes  $\mu$  y  $\Gamma$  son positivos, lo que es necesario para obtener velocidades  $v_L$  y  $v_T$  reales. Luego de las expresiones para  $q_T$ ,  $q_L$ ,  $\mathbf{B}$  y  $\mathbf{W}$  tenemos que:

- Si  $\omega > v_T \kappa_y$ ,  $v_L \kappa_y$  los eigenvalores son reales, hecho que concuerda con  $m(\mathbf{F}_\ell) < 0$  y  $w(\mathbf{F}_\ell) > 0$  en (2.24)
- Si  $\omega < v_T \kappa_y$ ,  $v_L \kappa_y$  los eigenvalores son imaginarios puros, en este caso  $m(\mathbf{F}_\ell) < 0$  y  $w(\mathbf{F}_\ell) < 0$
- Si  $v_T \kappa_y < \omega < v_L \kappa_y$  tenemos un eigenvalor real y otro imaginario puro, en este caso  $m(\mathbf{F}_\ell) < 0$  y  $w(\mathbf{F}_\ell)$  indefinida.

## EFA-2: Hamiltoniano de Dimmock

Problema 9 de la tabla 2.1. Este Hamiltoniano es aplicable al estudio de heteroestructuras construidas con compuestos II – VI como las sales de plomo PbS, PbSe, PbTe, etc., que tienen bordes de banda en el punto  $L$  de la zona de Brillouin pero el Gap (banda prohibida) es indirecto. Se trata de un Hamiltoniano que describe el acoplamiento entre dos bandas, en este caso las bandas de conducción y de valencia:

$$\mathbf{H}_{Dim} = \left\| \begin{array}{cc} -\frac{d}{dz} a_c \frac{d}{dz} + E_c + a_c' \kappa^2 & \kappa P_T + \frac{1}{2} \left( P_L \frac{d}{dz} + \frac{d}{dz} P_L \right) \\ \kappa P_T - \frac{1}{2} \left( P_L \frac{d}{dz} + \frac{d}{dz} P_L \right) & -\frac{d}{dz} a_v \frac{d}{dz} + E_v + a_v' \kappa^2 \end{array} \right\|. \quad (2.69)$$

Las etiquetas  $c/v$  se refieren a la banda de conducción/valencia. Las energías  $E_c$  y  $E_v$  corresponden a los bordes de las bandas de conducción y de valencia, respectivamente y  $a_c$ ,  $a_v$ ,  $a'_c$ ,  $a'_v$ ,  $P_L$  y  $P_T$  son parámetros que describen las dos bandas en cuestión y la intensidad de su acoplamiento. De aquí que:

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} a_c & 0 \\ 0 & a_v \end{pmatrix}; \quad \mathbf{P} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -P_L \\ P_L & 0 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{Y} = \mathbf{P}; \quad (2.70)$$

$$\mathbf{W} = E\mathbf{I} - \begin{pmatrix} E_c + a'_c \kappa^2 & 0 \\ 0 & E_v + a'_v \kappa^2 \end{pmatrix} - \kappa \begin{pmatrix} 0 & P_T \\ P_T & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.71)$$

Sea  $\varepsilon_c = E - E_c - a'_c \kappa^2$  y  $\varepsilon_v = E - E_v - a'_v \kappa^2$ . Sean  $\lambda_1$  y  $\lambda_2$  las raíces de la ecuación secular:

$$a_c a_v \lambda^2 - (P_L^2 + a_v \varepsilon_c + a_c \varepsilon_v) \lambda + (\varepsilon_c \varepsilon_v - P_T^2 \kappa^2) = 0. \quad (2.72)$$

Entonces los eigenvalores del QEP vendrán dados por:

$$+\sqrt{\lambda_1}, \quad -\sqrt{\lambda_1}; \quad +\sqrt{\lambda_2}, \quad -\sqrt{\lambda_2}. \quad (2.73)$$

La función de Green obtenida a partir de la expresión (2.23) resulta:

$$\mathbf{G}(z, z') = \frac{i}{2(q_2^2 - q_1^2) a_c a_v} \left[ -\mathbf{G}_1(z, z') \frac{e^{iq_1|z-z'|}}{q_1} + \mathbf{G}_2(z, z') \frac{e^{iq_2|z-z'|}}{q_2} \right]; \quad (2.74)$$

$$\mathbf{G}_j(z, z') = \begin{vmatrix} \varepsilon_v - a_v q_j^2 & P_T \kappa + i \operatorname{sgn}(z - z') P_L q_j \\ P_T \kappa - i \operatorname{sgn}(z - z') P_L q_j & \varepsilon_c - a_c q_j^2 \end{vmatrix}; \quad j = 1, 2, \quad (2.75)$$

los eigenvalores  $q_1, q_2$  vienen dados por las expresiones:

$$q_1 = +\sqrt{\lambda_1} = +\sqrt{\frac{P_L^2 + a_v \varepsilon_c + a_c \varepsilon_v - \sqrt{(P_L^2 + a_v \varepsilon_c + a_c \varepsilon_v)^2 - 4a_c a_v (\varepsilon_c \varepsilon_v - P_T^2 \kappa^2)}}{2a_c a_v}} \quad (2.76)$$

$$q_2 = +\sqrt{\lambda_2} = +\sqrt{\frac{P_L^2 + a_v \varepsilon_c + a_c \varepsilon_v + \sqrt{(P_L^2 + a_v \varepsilon_c + a_c \varepsilon_v)^2 - 4a_c a_v (\varepsilon_c \varepsilon_v - P_T^2 \kappa^2)}}{2a_c a_v}} \quad (2.77)$$

El cumplimiento de (2.33) fue verificado haciendo uso de la matriz:

$$\mathbf{C}_o^{T(par)}(q_j) = \begin{pmatrix} \varepsilon_v - a_v q_j^2 & P_T \kappa \\ P_T \kappa & \varepsilon_c - a_c q_j^2 \end{pmatrix}, \quad (2.78)$$

y de las expresiones:

$$D'(q_1) = -2q_1 \sqrt{(P_L^2 + a_v \varepsilon_c + a_c \varepsilon_v)^2 - 4a_c a_v (\varepsilon_c \varepsilon_v - P_T^2 \kappa^2)} \quad (2.79)$$

$$D'(q_2) = 2q_2 \sqrt{(P_L^2 + a_v \varepsilon_c + a_c \varepsilon_v)^2 - 4a_c a_v (\varepsilon_c \varepsilon_v - P_T^2 \kappa^2)} \quad (2.80)$$

Nótese que  $(\operatorname{Tr}[\mathbf{C}]) = 0$  por lo que  $\mathbf{C}$  es indefinida y, los eigenvalores aparecen por pares del tipo  $(k_\ell; -k_\ell)$ .

### 2.4.3 Problemas con $N = 3$

#### Modelo Fenomenológico completo

Este es el caso del problema 12 de la tabla 2.1. Se trata de un modelo fenomenológico en la aproximación de onda larga que describe el acoplamiento entre la amplitud de vibración  $\vec{u} = (u_x, u_y, u_z)^T$  de los modos

ópticos polares y el potencial electrostático  $\varphi$  en heteroestructuras semiconductoras [2]. El sistema original de ecuaciones de movimiento del modelo conduce a cuatro ecuaciones diferenciales parciales de segundo orden escalares, acopladas para las cuatro magnitudes involucradas (apéndice B). En un medio isotrópico, por ejemplo, el vector de onda  $\vec{\kappa}$  puede seleccionarse en la forma  $\vec{\kappa} = (0, \kappa_y)$  y el sistema se desacopla en una ecuación para un modo transversal horizontal  $u_x$  (sección 2.4.1) y en un sistema de tres ecuaciones diferenciales acopladas que describe el movimiento de un modo elástico sagital de la rama óptica acoplado con el potencial electrostático. Entonces  $N = 3$  y  $\mathbf{F} = (u_y, u_z, \varphi)^T$ . Del procedimiento de desacople descrito, resulta:

$$\rho(\beta_L^2 + \beta_T^2) \frac{d^2 u_y}{dz^2} - \rho[\beta_L^2 \kappa_y^2 + (\omega^2 - \omega_T^2)] u_y - \rho \beta_T^2 i \kappa_y \frac{du_z}{dz} + i \alpha \kappa_y \varphi = 0. \quad (2.81)$$

$$\rho \beta_L^2 \frac{d^2 u_z}{dz^2} - \rho[(\beta_L^2 + \beta_T^2) \kappa_y^2 + (\omega^2 - \omega_T^2)] u_z - \rho \beta_T^2 i \kappa_y \frac{du_y}{dz} + \alpha \frac{d\varphi}{dz} = 0. \quad (2.82)$$

$$\frac{\epsilon_\infty}{4\pi} \frac{d^2 \varphi}{dz^2} - \frac{\epsilon_\infty}{4\pi} \kappa_y^2 \varphi - \alpha \frac{du_z}{dz} - \alpha i \kappa_y u_y = 0. \quad (2.83)$$

Como es usual  $\omega_T$  denota la frecuencia del modo óptico transversal en el punto  $\Gamma$  de la zona de Brillouin. Los parámetros  $\beta_L$ ,  $\beta_T$  caracterizan la parabolicidad de las ramas ópticas del espectro de fonones en la vecindad del punto  $\Gamma$ ,  $\epsilon_\infty$  es la constante dieléctrica a alta frecuencia,  $\rho$  es la densidad de masa reducida. Dada la simetría cúbica de los materiales que considera el modelo, el tensor  $\hat{\alpha}$  que describe el acoplamiento entre el vector de vibración  $\vec{u}$  y el campo eléctrico toma una forma diagonal simple  $\hat{\alpha} = \alpha \mathbf{I}$  con  $\alpha$  expresado en términos de  $\epsilon_\infty$ ,  $\rho$ ,  $\omega_T$  y la constante dieléctrica estática  $\epsilon_0$ . Valores de los parámetros mencionados se pueden encontrar en la tabla 1.1 de [2].

Este sistema de ecuaciones (2.81)-(2.83) puede ser llevado a la forma Sturm-Liouville matricial obteniéndose los siguientes coeficientes matriciales:

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} \rho(\beta_L^2 + \beta_T^2) & 0 & 0 \\ 0 & \rho \beta_L^2 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\epsilon_\infty}{4\pi} \end{pmatrix}. \quad (2.84)$$

$$\mathbf{P} + \mathbf{Y} = \begin{pmatrix} 0 & -\rho \beta_T^2 i \kappa_y & 0 \\ -\rho \beta_T^2 i \kappa_y & 0 & \alpha \\ 0 & -\alpha & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.85)$$

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} -\rho[\beta_L^2 \kappa_y^2 + (\omega^2 - \omega_T^2)] & 0 & i \alpha \kappa_y \\ 0 & -\rho[(\beta_L^2 + \beta_T^2) \kappa_y^2 + (\omega^2 - \omega_T^2)] & 0 \\ -i \alpha \kappa_y & 0 & -\frac{\epsilon_\infty}{4\pi} \kappa_y^2 \end{pmatrix}. \quad (2.86)$$

De la ecuación secular  $\text{Det} [-k_\ell^2 \mathbf{B} + i k_\ell (\mathbf{P} + \mathbf{Y}) + \mathbf{W}] = 0$ , se obtuvieron los eigenvalores del QEP (sección 2.2):

$$\begin{aligned} k_1 &= i \kappa_y & k_2 &= -k_1; \\ k_3 &= \sqrt{\frac{\omega_T^2 - \omega^2}{\beta_L^2 + \beta_T^2} - \kappa_y^2} & k_4 &= -k_3; \\ k_5 &= \frac{1}{\beta_L} \sqrt{\frac{4\pi \alpha^2}{\epsilon_\infty \rho} - \kappa_y^2 \beta_L^2 + (\omega_T^2 - \omega^2)} & k_6 &= -k_5. \end{aligned} \quad (2.87)$$



La función de Green obtenida a partir de la expresión (2.23) resulta:

$$\begin{aligned} \mathbf{G}(z, z') &= \frac{i2\pi\alpha}{4\pi\alpha^2 + \epsilon_\infty\rho(\omega_T^2 - \omega^2)} \mathbf{G}_1(z, z') e^{ik_1|z-z'|} + \frac{i}{2\rho(\omega^2 - \omega_T^2)} \mathbf{G}_3(z, z') e^{ik_3|z-z'|} \\ &+ \frac{i}{4\pi\alpha^2 + \epsilon_\infty\rho(\omega_T^2 - \omega^2)} \mathbf{G}_5(z, z') e^{ik_5|z-z'|}; \end{aligned} \quad (2.88)$$

$$\mathbf{G}_1(z, z') = \begin{pmatrix} -\frac{i\kappa_y\alpha}{\rho(\omega^2 - \omega_T^2)} & \frac{\kappa_y\alpha \operatorname{sgn}(z-z')}{\rho(\omega^2 - \omega_T^2)} & 1 \\ \frac{\kappa_y\alpha \operatorname{sgn}(z-z')}{\rho(\omega^2 - \omega_T^2)} & \frac{i\kappa_y\alpha}{\rho(\omega^2 - \omega_T^2)} & i \operatorname{sgn}(z-z') \\ -1 & -i \operatorname{sgn}(z-z') & -\frac{i\rho(\omega^2 - \omega_T^2)}{\kappa_y\alpha} \end{pmatrix}; \quad (2.89)$$

$$\mathbf{G}_3(z, z') = \begin{pmatrix} k_3 & -\kappa_y \operatorname{sgn}(z-z') & 0 \\ -\kappa_y \operatorname{sgn}(z-z') & \frac{\kappa_y^2}{k_3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad (2.90)$$

$$\mathbf{G}_5(z, z') = \begin{pmatrix} -\frac{\kappa_y^2 \epsilon_\infty}{2k_5} & -\frac{\kappa_y \epsilon_\infty \operatorname{sgn}(z-z')}{2} & -\frac{i2\kappa_y \pi \alpha}{k_5} \\ -\frac{\kappa_y \epsilon_\infty \operatorname{sgn}(z-z')}{2} & -\frac{\epsilon_\infty k_5}{2} & -i2\pi\alpha \operatorname{sgn}(z-z') \\ \frac{i2\kappa_y \pi \alpha}{k_5} & i2\pi\alpha \operatorname{sgn}(z-z') & -\frac{8\pi^2 \alpha^2}{\epsilon_\infty k_5} \end{pmatrix}; \quad (2.91)$$

El cumplimiento de (2.33) fue verificado haciendo uso de la matriz  $\mathbf{C}_o^{T(par)}$  cuyos elementos se exponen en el apéndice B y de las expresiones de  $D'(k_1)$ ,  $D'(k_2)$  y  $D'(k_3)$  también expuestas en dicho apéndice. Nótese que  $(\operatorname{Tr}[\mathbf{C}]) = 0$  por lo que  $\mathbf{C}$  es indefinida, y los eigenvalores aparecen por pares del tipo  $(k_\ell; -k_\ell)$ .

Del análisis de los eigenvalores de  $\mathbf{B}$  y  $\mathbf{W}$  tenemos que:

- $m(\mathbf{F}_\ell) < 0$
- $w(\mathbf{F}_\ell)$  es indefinida si  $\omega^2 < \omega_T^2 - \kappa_y^2 \beta_L^2 + \frac{4\pi\alpha^2}{\epsilon_\infty\rho}$ , en caso contrario solo puede ser  $w(\mathbf{F}_\ell) < 0$ ,

de manera que las relaciones (2.24) no nos permiten predecir si los eigenvalores podrán ser reales o complejos.

A partir de las expresiones para  $k_1$ ,  $k_3$  y  $k_5$  se llega a la conclusión de que los eigenvalores formarán:

- Tres pares imaginarios si  $\omega^2 > \omega_T^2 - \kappa_y^2 \beta_L^2 + \frac{4\pi\alpha^2}{\epsilon_\infty\rho}$ ,
- Un par imaginario y dos reales si  $\omega^2 < \omega_T^2 - \kappa_y^2(\beta_L^2 + \beta_T^2)$ ,
- Dos pares imaginarios y uno real si  $\omega_T^2 - \kappa_y^2(\beta_L^2 + \beta_T^2) < \omega^2 < \omega_T^2 - \kappa_y^2 \beta_L^2 + \frac{4\pi\alpha^2}{\epsilon_\infty\rho}$ .

### Modos elásticos en cristales con diferentes simetría

Considérese para comenzar un medio elástico ortotrópico. Después de aplicar una transformada de Fourier a la ecuación de movimiento de la onda elástica se obtiene un sistema de tres ecuaciones diferenciales de segundo orden acopladas para las componentes  $u_x$ ,  $u_y$  y  $u_z$  del desplazamiento de un punto arbitrario en el sólido (apéndice C). De dichas ecuaciones se obtienen los coeficientes matriciales:

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} c_{55} & 0 & 0 \\ 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & c_{33} \end{pmatrix} \quad (2.92)$$

$$(\mathbf{P} + \mathbf{Y}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i\kappa_x(c_{13} + c_{55}) \\ 0 & 0 & i\kappa_y(c_{23} + c_{44}) \\ i\kappa_x(c_{13} + c_{55}) & i\kappa_y(c_{23} + c_{44}) & 0 \end{pmatrix} \quad (2.93)$$

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} \rho\omega^2 - c_{11}\kappa_x^2 - c_{66}\kappa_y^2 & -(c_{12} + c_{66})\kappa_x\kappa_y & 0 \\ -(c_{12} + c_{66})\kappa_x\kappa_y & \rho\omega^2 - c_{66}\kappa_x^2 - c_{22}\kappa_y^2 & 0 \\ 0 & 0 & \rho\omega^2 - c_{55}\kappa_x^2 - c_{44}\kappa_y^2 \end{pmatrix}. \quad (2.94)$$

Como la matriz  $\mathbf{B}$  es regular tendremos un conjunto de  $2N = 6$  eigenvalores. Se puede verificar analíticamente que el polinomio secular  $\text{Det} [-k^2\mathbf{B} + ik(\mathbf{P} + \mathbf{Y}) + \mathbf{W}]$  se compone de potencias pares de  $k$  de manera que los eigenvalores formarán pares del tipo  $(k_\ell; -k_\ell)$ . Nótese que  $(\text{Tr}[\mathbf{C}]) = 0$  por lo que  $\mathbf{C}$  es indefinida.

En este punto conviene aclarar que en general, los problemas cuadráticos de eigenvalores en los que la matriz secular (2.8) tiene un término  $\mathbf{P} + \mathbf{Y} \neq \mathbf{0}$ , no conducen a la formación de pares del tipo  $(k_\ell; -k_\ell)$ . Este es el caso, por ejemplo, de un cristal triclinico donde el polinomio secular contiene tanto potencias pares como impares de  $k$  y en general no se forman los mencionados pares. Sin embargo para cristales con simetría ortogonal si tenemos formación de pares del tipo  $(k_\ell; -k_\ell)$ . La formación de estos pares también se comprobó analíticamente en algunos cristales con mayor simetría donde el número de componentes independientes del tensor de rigidez  $c_{\alpha\beta}$  se reduce como consecuencia de las propiedades de simetría del cristal. Este es el caso, por ejemplo, de cristales con simetría tetragonal (4 mm), así como en cristales con simetría hexagonal, cúbica y cristales isotrópicos.

En un cristal triclinico el tensor de rigidez  $c$  tiene  $n = 21$  componentes independientes; pero en materiales ortotrópicos  $n = 9$ , en materiales tetragonales (4 mm)  $n = 6$ , en un material transversalmente isotrópico  $n = 5$ , en materiales cúbicos  $n = 3$  y en un material isotrópico  $n = 2$ . Para los cristales con  $n \leq 9$  mencionados, la ecuación secular es una ecuación de orden 3 en  $k_\ell^2$  en correspondencia con las ecuaciones seculares obtenidas en [3]. El problema 14 de la tabla 2.1 agrupa los casos del medio ortotrópico, tetragonal (4 mm), transversalmente isotrópico, cúbico e isotrópico los cuales pueden ser tratados partiendo de las expresiones (2.92)-(2.94).

Por otra parte, en cristales como el trigonal donde el número de componentes independientes del tensor de rigidez  $c_{\alpha\beta}$  puede ser  $n = 6$ , se comprobó analíticamente que el polinomio secular contiene tanto potencias pares como impares de  $k$ , por lo que en general no se formarán los pares del tipo  $(k_\ell; -k_\ell)$ . En cambio, el análisis para el caso de un cristal monoclinico donde  $n = 13$  conduce a un polinomio secular compuesto solo por potencias pares de  $k$  y por tanto a la formación de los pares  $(k_\ell; -k_\ell)$ .

Los datos antes expuestos indican una relación estrecha entre la simetría del cristal y la formación de los pares  $(k_\ell; -k_\ell)$ , más allá de la simple reducción del número de componentes independientes del tensor de rigidez.

**Modos Piezoeléctricos. Cristales con diferentes simetría**

Considérese para comenzar un material piezoeléctrico ortotrópico 2 mm. Después de aplicar una transformada de Fourier a la ecuación de movimiento de la onda piezoeléctrica, se obtiene un sistema de cuatro ecuaciones diferenciales de segundo orden acopladas para las componentes  $u_x$ ,  $u_y$  y  $u_z$  del desplazamiento de un punto arbitrario en el sólido y el potencial eléctrico  $\phi$  (apéndice D). De dichas ecuaciones se obtienen los coeficientes matriciales:

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} c_{55} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c_{33} & e_{33} \\ 0 & 0 & e_{33} & -\epsilon_{33} \end{pmatrix}. \quad (2.95)$$

$$\mathbf{P} + \mathbf{Y} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i\kappa_x(c_{13} + c_{55}) & i\kappa_x(e_{15} + e_{31}) \\ 0 & 0 & i\kappa_y(c_{23} + c_{44}) & i\kappa_y(e_{24} + e_{32}) \\ i\kappa_x(c_{13} + c_{55}) & i\kappa_y(c_{23} + c_{44}) & 0 & 0 \\ i\kappa_x(e_{15} + e_{31}) & i\kappa_y(e_{24} + e_{32}) & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.96)$$

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} (\rho\omega^2 - c_{11}\kappa_x^2 - c_{66}\kappa_y^2) & -(c_{12} + c_{66})\kappa_x\kappa_y & 0 & 0 \\ -(c_{66} + c_{12})\kappa_x\kappa_y & (\rho\omega^2 - c_{66}\kappa_x^2 - c_{22}\kappa_y^2) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & (\rho\omega^2 - c_{55}\kappa_x^2 - c_{44}\kappa_y^2) & -(e_{15}\kappa_x^2 + e_{24}\kappa_y^2) \\ 0 & 0 & -(e_{15}\kappa_x^2 + e_{24}\kappa_y^2) & (\epsilon_{11}\kappa_x^2 + \epsilon_{22}\kappa_y^2) \end{pmatrix}. \quad (2.97)$$

Aquí  $c_{\alpha\beta}$ ;  $\alpha, \beta = 1, \dots, 6$  son las componentes del tensor de rigidez,  $e_{i\alpha}$ ;  $i = 1, 2, 3$ ,  $\alpha = 1, \dots, 6$  las componentes del tensor piezoeléctrico y  $\epsilon_{jk}$ ;  $j, k = 1, 2, 3$  las del tensor dieléctrico.

En las figuras 3.10 y 3.15 de [47] se pueden encontrar valores de los coeficientes piezoeléctricos, dieléctricos y elásticos para materiales con diferentes simetrías. Considerando los valores que toman los coeficientes que intervienen en la matriz  $\mathbf{B}$  para un conjunto amplio de materiales piezoeléctricos se determinó que esta es regular y por tanto se tendrá un conjunto de  $2N = 8$  eigenvalores. Se puede verificar analíticamente que el polinomio secular  $\text{Det} [-k^2\mathbf{B} + ik(\mathbf{P} + \mathbf{Y}) + \mathbf{W}]$  se compone de potencias pares de  $k$  de manera que los eigenvalores formarán pares del tipo  $(k_\ell; -k_\ell)$ . Nótese que  $(\text{Tr}[\mathbf{C}]) = 0$  por lo que  $\mathbf{C}$  es indefinida.

Al igual que en el medio elástico, en el piezoeléctrico la formación de pares del tipo  $(k_\ell; -k_\ell)$  también está asociada a la simetría del cristal. En un cristal triclinico el polinomio secular correspondiente al problema piezoeléctrico contiene tanto potencias pares como impares de  $k$  y en general no se forman los mencionados pares. Sin embargo como ya mencionamos, en cristales con simetría ortogonal sí tenemos formación de pares del tipo  $(k_\ell; -k_\ell)$ , hecho que fue comprobado también en algunos cristales con mayor simetría, por ejemplo los tetragonales (4 mm), transversalmente isotrópico (6 mm), así como en cristales con simetría cúbica y cristales isotrópicos donde el número de componentes  $c_{\alpha\beta}$ ,  $e_{i\alpha}$  y  $\epsilon_{jk}$  independientes se reduce como consecuencia de las propiedades de simetría del cristal.

En un cristal triclinico los tensores de rigidez, piezoeléctrico y dieléctrico tienen, respectivamente, 21, 18 y 6 componentes independientes; en materiales ortotrópicos (2 mm) 9, 5 y 3; en materiales tetragonales (4 mm) 6, 3 y 2; en un material transversalmente isotrópico (6 mm) 5, 3 y 2 y menos componentes independientes en materiales cúbicos e isotrópicos.

Sin embargo, en cristales como el trigonal donde el número de componentes independientes es 6, 2 y 2, se comprobó analíticamente que el polinomio secular contiene tanto potencias pares como impares de  $k$ , por lo que en general no se formarán los pares del tipo  $(k_\ell; -k_\ell)$ . En cambio, el análisis para el caso de un cristal monoclinico (los números son 13, 10 y 4 respectivamente) conduce a un polinomio secular compuesto solo por potencias pares de  $k$  y por tanto a la formación de los pares  $(k_\ell; -k_\ell)$ .

Al igual que en el medio elástico, los datos expuestos indican una relación estrecha entre la simetría del cristal y la formación de los pares  $(k_\ell; -k_\ell)$  para el sistema piezoeléctrico.

Como ejemplo tenemos el problema 13 de la tabla 2.1. Se trata de una vibración sagital acoplada a un potencial electrostático. Consideremos un material transversalmente isotrópico (6 mm) cuyo eje principal de simetría está orientado en la dirección  $z$ , entonces en el plano  $xy$  el material es isotrópico y el vector de onda  $\vec{k}$  puede seleccionarse en la forma  $\vec{k} = (0, \kappa_y)$ . De esta forma el sistema de cuatro ecuaciones diferenciales acopladas (apéndice D) del que derivan los coeficientes matriciales (2.95)-(2.97) se desacopla en una ecuación para la componente  $u_x(z)$  y en un sistema de tres ecuaciones diferenciales acopladas para  $\mathbf{F}(z) = [u_y(z), u_z(z), \phi(z)]^T$ . Como resultado los coeficientes matriciales de la ESLM resultan:

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & c_{33} & e_{33} \\ 0 & e_{33} & -\epsilon_{33} \end{pmatrix} \quad (2.98)$$

$$\mathbf{P} + \mathbf{Y} = \begin{pmatrix} 0 & i\kappa_y(c_{13} + c_{44}) & i\kappa_y(e_{15} + e_{31}) \\ i\kappa_y(c_{13} + c_{44}) & 0 & 0 \\ i\kappa_y(e_{15} + e_{31}) & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.99)$$

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} (\rho\omega^2 - c_{11}\kappa_y^2) & 0 & 0 \\ 0 & (\rho\omega^2 - c_{44}\kappa_y^2) & -e_{15}\kappa_y^2 \\ 0 & -e_{15}\kappa_y^2 & \epsilon_{11}\kappa_y^2 \end{pmatrix}. \quad (2.100)$$

Se tuvo en cuenta que para el material transversalmente isotrópico (6mm):  $c_{23} = c_{13}$ ,  $c_{22} = c_{11}$ ,  $c_{55} = c_{44}$ ,  $e_{24} = e_{15}$ ,  $e_{32} = e_{31}$ .

Tanto en el caso del medio elástico como en el medio piezoeléctrico, ambos con  $N = 3$ , las expresiones analíticas de los eigenvalores pueden resultar engorrosas dificultando de igual forma la expresión de la función de Green. En estos casos, la obtención de  $\mathbf{G}(z, z')$  y su validación pueden realizarse siguiendo el procedimiento que se describe en la siguiente sección en la cual se tratan los modos magneto-electro-elásticos ( $N = 5$ ).

#### 2.4.4 Problemas con $N = 5$

##### Modos magneto-electro-elásticos

El análisis que sigue corresponde el problema 16 de la tabla 2.1. Para estudiar modos magneto-electro-elásticos partimos del sistema de ecuaciones diferenciales obtenido en [44] para un material homogéneo con simetría 6 mm que exhibe propiedades magneto-electro-elásticas y donde la magnetización y la polarización están dirigidas en la dirección del eje  $z$  de acuerdo con el sistema de coordenadas utilizado en dicha referencia. La figura 2.1 es una copia del esquema de la heteroestructura analizada en [44] en la que hemos indicado, adicionalmente, la orientación de nuestro sistema de ejes coordenados. El sistema consta de cinco ecuaciones diferenciales parciales acopladas (Eqs. 8-12 de [44]) cuyas incógnitas son las tres componentes elásticas del desplazamiento:  $(u_x, u_y, u_z)$ , la función potencial eléctrico ( $\varphi$ ) y la función potencial magnético ( $\psi$ ). No obstante, el trabajo presentado en [44] está enfocado al estudio de modos horizontales transversales (SH) con lo cual el sistema original de ecuaciones de movimiento se reduce a tres ecuaciones diferenciales acopladas para las componentes  $u_z, \varphi$  y  $\psi$ .

Para el análisis que haremos se tendrán en cuenta las cinco ecuaciones diferenciales parciales acopladas del sistema original. En nuestro sistema de ejes coordenados (figura 2.1) el eje principal de simetría del material que compone las capas queda orientado en la dirección del eje  $x$  (dirección horizontal) de manera que en el plano  $xy$  debemos trabajar con ambas componentes del vector de onda  $\vec{k} = (\kappa_x, \kappa_y)$ . En el apéndice E se muestran las ecuaciones de movimiento (Eqs. 8-12 de [44]) Fourier transformadas y

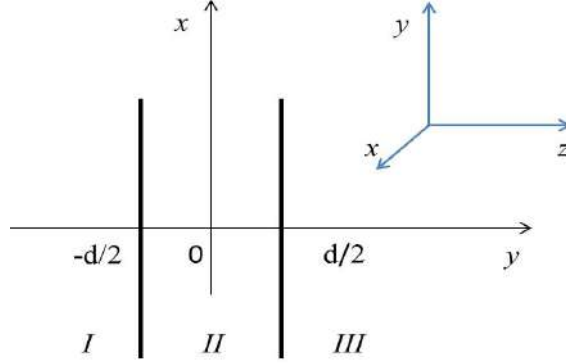


Figura 2.1: Esquema de una heteroestructura compuesta por tres materiales Magneto-electro-elásticos dibujado en [44] para el estudio de modos Magneto-electro-elásticos. En el extremo superior derecho hemos indicado, adicionalmente, la orientación de nuestro sistema de ejes coordenados.

adaptadas a nuestro sistema de coordenadas. Llevadas a la forma Sturm-Liouville matricial en un medio homogéneo (2.5) con  $\mathbf{F}(z) = [u_y, u_z, u_x, \varphi, \psi]^T$  se tendrán los siguientes coeficientes matriciales:

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} c_{66} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c_{44} & e_{15} & f_{15} \\ 0 & 0 & e_{15} & -\epsilon_{11} & -g_{11} \\ 0 & 0 & f_{15} & -g_{11} & -\mu_{11} \end{pmatrix}; \quad (2.101)$$

$$\mathbf{P} + \mathbf{Y} = \begin{pmatrix} 0 & (c_{12} + c_{66})i\kappa_y & 0 & 0 & 0 \\ (c_{12} + c_{66})i\kappa_y & 0 & (c_{13} + c_{44})i\kappa_x & (e_{31} + e_{15})i\kappa_x & (f_{31} + f_{15})i\kappa_x \\ 0 & (c_{13} + c_{44})i\kappa_x & 0 & 0 & 0 \\ 0 & (e_{31} + e_{15})i\kappa_x & 0 & 0 & 0 \\ 0 & (f_{31} + f_{15})i\kappa_x & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad (2.102)$$

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} (\rho\omega^2 - c_{11}\kappa_y^2 - c_{44}\kappa_x^2) & 0 & -(c_{13} + c_{44})\kappa_x\kappa_y & -(e_{31} + e_{15})\kappa_x\kappa_y & \mathbf{W}_{15} \\ 0 & (\rho\omega^2 - c_{66}\kappa_y^2 - c_{44}\kappa_x^2) & 0 & 0 & 0 \\ -(c_{13} + c_{44})\kappa_x\kappa_y & 0 & (\rho\omega^2 - c_{44}\kappa_y^2 - c_{33}\kappa_x^2) & -(e_{15}\kappa_y^2 + e_{33}\kappa_x^2) & \mathbf{W}_{35} \\ -(e_{31} + e_{15})\kappa_x\kappa_y & 0 & -(e_{15}\kappa_y^2 + e_{33}\kappa_x^2) & (\epsilon_{11}\kappa_y^2 + \epsilon_{33}\kappa_x^2) & \mathbf{W}_{45} \\ -(f_{31} + f_{15})\kappa_x\kappa_y & 0 & -(f_{15}\kappa_y^2 + f_{33}\kappa_x^2) & (g_{11}\kappa_y^2 + g_{33}\kappa_x^2) & \mathbf{W}_{55} \end{pmatrix}; \quad (2.103)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{W}_{15} &= -(f_{31} + f_{15})\kappa_x\kappa_y; \\ \mathbf{W}_{35} &= -(f_{15}\kappa_y^2 + f_{33}\kappa_x^2); \\ \mathbf{W}_{45} &= (g_{11}\kappa_y^2 + g_{33}\kappa_x^2); \\ \mathbf{W}_{55} &= (\mu_{11}\kappa_y^2 + \mu_{33}\kappa_x^2). \end{aligned} \quad (2.104)$$

Los parámetros  $c_{pq}$ ,  $\epsilon_{ij}$ ,  $\mu_{ij}$ ,  $e_{iq}$ ,  $f_{ij}$  y  $g_{ij}$  ( $p, q = 1, \dots, 6; i, j = 1, 2, 3$ ) son los coeficientes elástico, dieléctrico, permeabilidad magnética, piezoeléctrico, piezomagnético y magnetoeléctrico respectivamente,  $\rho$  es la densidad del material.

A partir de las expresiones (2.101)-(2.103) se comprobó que el determinante de la matriz secular solo contiene potencias pares del eigenvalor  $k$ , lo que indica que estos forman pares del tipo  $(k_\ell; -k_\ell)$ . Pero

en este caso  $N = 5$  no fue posible obtener expresiones analíticas de dichos eigenvalores. Analicemos entonces el compuesto magneto-electro-elástico  $\text{BaTiO}_3/\text{CoFe}_2\text{O}_4$  cuyas propiedades físicas  $c_{pq}$ ,  $\epsilon_{ij}$ ,  $\mu_{ij}$ ,  $e_{iq}$ ,  $f_{iq}$  y  $g_{ij}$  efectivas han sido calculadas mediante modelos teóricos de homogenización en términos de la fracción molar de  $\text{BaTiO}_3$  [48, 49]. Los resultados que mostraremos estarán dados para un compuesto cuya fracción molar de  $\text{BaTiO}_3$  es 0.3. El apéndice F contiene valores efectivos de las propiedades físicas que caracterizan al material  $\text{BaTiO}_3/\text{CoFe}_2\text{O}_4$  para la fracción molar indicada.

En este caso la matriz  $\mathbf{B}$  es *regular* ( $\text{Det}[\mathbf{B}] \neq 0$ ) por tanto se tendrán 10 eigenvalores que forman pares del tipo  $(k_\ell; -k_\ell)$ . Las expresiones analíticas de los elementos matriciales de  $\mathbf{C}_o^T(\text{sgn}(z - z') \cdot k_\ell)$  en (2.23) son muy extensas, sin embargo podemos expresarlas en forma simplificada indicando donde aparecen potencias pares e impares de  $k_\ell$ . Por ejemplo: podemos utilizar  $(k_\ell^2)_{ij}$  para indicar que el elemento matricial  $ij$  solo contiene potencias pares de  $k_\ell$  o  $(\text{sgn}(z - z') \cdot k_\ell)_{ij}$  para indicar que solo contienen potencias impares de  $\text{sgn}(z - z') \cdot k_\ell$ ;  $k_\ell \in K_\uparrow$ ;  $i, j = 1, 2, 3, 4, 5$ . Debe tenerse en cuenta que cada elemento matricial  $ij$  es un polinomio diferente en potencias de  $k_\ell$ , y que depende también de  $\kappa_x, \kappa_y$  y  $\omega$ .

Para este problema  $N = 5$  se tiene que:

$$\mathbf{C}_o^T(\text{sgn}(z - z') \cdot k_\ell) = \begin{pmatrix} (k_\ell^2)_{11} & (\text{sgn}(z - z') \cdot k_\ell)_{12} & (k_\ell^2)_{13} & (k_\ell^2)_{14} & (k_\ell^2)_{15} \\ (\text{sgn}(z - z') \cdot k_\ell)_{21} & (k_\ell^2)_{22} & (\text{sgn}(z - z') \cdot k_\ell)_{23} & (\text{sgn}(z - z') \cdot k_\ell)_{24} & (\text{sgn}(z - z') \cdot k_\ell)_{25} \\ (k_\ell^2)_{31} & (\text{sgn}(z - z') \cdot k_\ell)_{32} & (k_\ell^2)_{33} & (k_\ell^2)_{34} & (k_\ell^2)_{35} \\ (k_\ell^2)_{41} & (\text{sgn}(z - z') \cdot k_\ell)_{42} & (k_\ell^2)_{43} & (k_\ell^2)_{44} & (k_\ell^2)_{45} \\ (k_\ell^2)_{51} & (\text{sgn}(z - z') \cdot k_\ell)_{52} & (k_\ell^2)_{53} & (k_\ell^2)_{54} & (k_\ell^2)_{55} \end{pmatrix}. \quad (2.105)$$

Como se indicó en la sección 2.3.2 el denominador  $D'(k_\ell)$  en (2.23) contiene solo potencias impares de  $k_\ell \in K_\uparrow$ . En este caso expresamos  $D'(k_\ell) = f(\kappa_x, \kappa_y, \omega, k_\ell)$ .

La matriz  $\mathbf{B}^{-1}$  se muestra en el apéndice F. Conocida  $\mathbf{B}^{-1}$  el cumplimiento de (2.31) se verificó para valores arbitrarios de  $\kappa_x$ ,  $\kappa_y$  y  $\omega$ . Para dichas evaluaciones la forma hermitica  $m(\mathbf{F}_\ell)$  resultó indefinida dado que la matriz  $\mathbf{m} = -\mathbf{B}$  presentó eigenvalores positivos y negativos. Esto estuvo en correspondencia con la aparición de eigenvalores  $k_\ell$  que formaron combinaciones de pares reales y complejos.

Nótese que  $(\text{Tr}[\mathbf{C}]) = 0$  por lo que  $\mathbf{C}$  es indefinida, y los eigenvalores aparecen por pares del tipo  $(k_\ell; -k_\ell)$ .

### 2.4.5 Aproximación de la función envolvente (EFA)-N

Uno de los modelos más simples y versátiles utilizados para la determinación de eigenestados en heteroestructuras es el modelo de aproximación de la función envolvente (EFA). El modelo básicamente se restringe a la vecindad de los puntos de alta simetría de la Zona de Brillouin  $\Gamma$ ,  $X$  y  $L$ . En lo que sigue se considerará una heteroestructura compuesta de dos materiales semiconductores A y B cuyas redes cristalinas acoplan perfectamente y que cristalizan con la misma estructura cristalográfica (en la mayoría de los casos estructura zinblenda o blenda de zinc). La aproximación de acople cristalino perfecto se justifica relativamente bien en  $\text{GaAs-Ga(Al)As}$  y  $\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As} - \text{InP}$ , donde el desacople cristalino relativo  $\delta a/a = (a_B - a_A)/a_A$  entre los materiales A y B se encuentra entre 0 y 0.1% por ciento [1]. El parámetro  $a_B/a_A$  es la constante de red del material B/A.

El modelo considera que la interface entre los dos semiconductores es ideal y la representa mediante la variación continua de un borde de banda dependiente de la posición, como se indica en la figura 2.2. Las justificaciones y otros detalles del modelo se pueden encontrar en [1]. Aquí solo se indicarán los aspectos esenciales que permitirán obtener los coeficientes matriciales  $\mathbf{B}(z)$ ,  $\mathbf{P}(z)$ ,  $\mathbf{Y}(z)$  y  $\mathbf{W}(z)$ .

Se parte de dos suposiciones claves:

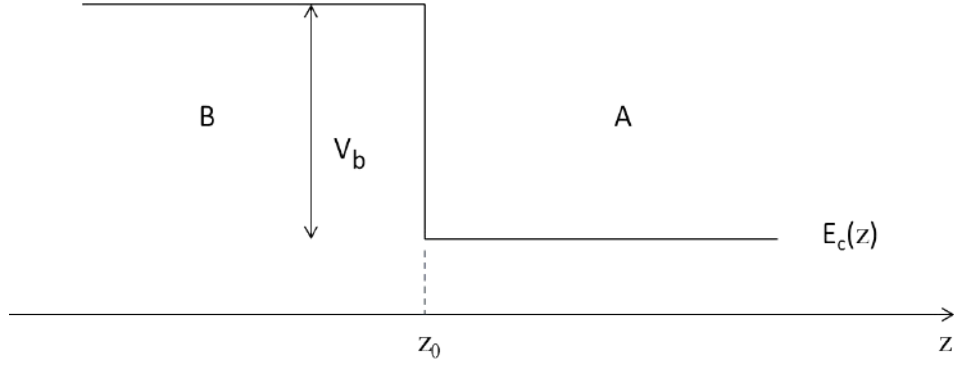


Figura 2.2: Representación unidimensional de una heterounión formada por dos semiconductores A y B perfectamente acoplados en términos de un borde de banda de conducción dependiente de la posición.

- En cada capa la función de onda se expande en términos de las partes periódicas  $u_{l,\mathbf{k}_0}$  de las funciones de Bloch correspondientes a los bordes de bandas considerados:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_l f_l^{(A)}(\mathbf{r}) u_{l,\mathbf{k}_0}^{(A)}(\mathbf{r}), \quad (2.106)$$

si  $\mathbf{r}$  corresponde a una capa A y,

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_l f_l^{(B)}(\mathbf{r}) u_{l,\mathbf{k}_0}^{(B)}(\mathbf{r}) \quad (2.107)$$

si  $\mathbf{r}$  corresponde a una capa B. En las ecuaciones (2.106) y (2.107),  $\mathbf{k}_0$  es el punto en la Zona de Brillouin (ZB) alrededor del cual se construyen los estados de la heteroestructura. La suma en  $l$  abarca tantos bordes de bandas como sean considerados en el análisis.

- Las partes periódicas de las funciones de Bloch se asume que serán iguales en cada tipo de capa que compone la heteroestructura:

$$u_{l,\mathbf{k}_0}^{(A)}(\mathbf{r}) \equiv u_{l,\mathbf{k}_0}^{(B)}(\mathbf{r}). \quad (2.108)$$

Por ello la función de onda de esta heteroestructura se podrá escribir como:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_l f_l^{(A,B)}(\mathbf{r}) u_{l,\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) \quad (2.109)$$

y el objetivo será determinar  $f_l^{(A,B)}(\mathbf{r})$ ;  $l$  es el índice de la banda.

Las implicaciones de estas suposiciones se detallan en [1]. Sea el plano  $z = z_0$  la interface que separa las capas A y B. Como las  $u_{l,\mathbf{k}_0}$  son linealmente independientes y como  $\psi(\mathbf{r})$  tendrá que ser continua en  $z = z_0$ , resulta que:

$$f_l^{(A)}(\mathbf{r}_\perp, z_0) = f_l^{(B)}(\mathbf{r}_\perp, z_0) \quad (2.110)$$

donde  $\mathbf{r}_\perp$  es el vector de posición en el plano  $(x, y)$ . Como se asume que la constante de la red es la misma, al menos en todo el plano de la capa, la heteroestructura pasa a ser invariante ante traslaciones en el plano de la capa. Por eso las  $f_l$  s pueden factorizarse de la forma siguiente:

$$f_l^{(A)}(\mathbf{r}_\perp, z) = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{i\mathbf{k}_\perp \cdot \mathbf{r}_\perp} \chi_l^{(A)}(z) \quad (2.111)$$

$$f_l^{(B)}(\mathbf{r}_\perp, z) = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{i\mathbf{k}_\perp \cdot \mathbf{r}_\perp} \chi_l^{(B)}(z) \quad (2.112)$$

o en forma breve:

$$f_l^{(A,B)}(\mathbf{r}_\perp, z) = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{i(\mathbf{k}_\perp \cdot \mathbf{r}_\perp)} \chi_l^{(A,B)}(z) \quad (2.113)$$

donde  $S$  es el área de la muestra y  $\mathbf{k}_\perp = (k_x, k_y)$  es un vector de onda bidimensional el cual es el mismo en las capas  $A$  y  $B$  con el fin de cumplir con la invariancia traslacional en el plano paralelo a las intercaras.

Con  $E_{l\mathbf{k}_0}^{(A)}$  y  $E_{l\mathbf{k}_0}^{(B)}$  se denotan las energías del borde de la banda  $l$  en alguno de los puntos de alta simetría de la ZB para el material  $A$  y  $B$  respectivamente. Se asume, además, que para todo  $l$ ,  $\chi_l^{(A,B)}(z)$  varía muy lentamente a escala de la celda unidad de la capa.

Del Método  $\vec{k} \cdot \vec{p}$  sabemos que para vectores de Bloch  $\mathbf{k}$  en un entorno del punto  $\mathbf{k}_0$ , o sea  $\mathbf{k} \approx \mathbf{k}_0$  podemos escribir:

$$\hat{H}(\mathbf{k}) = \hat{H}(\mathbf{k}_0) + \hat{W}; \quad (2.114)$$

$$\hat{H}(\mathbf{k}_0) = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k}_0 \cdot \hat{\mathbf{p}} + \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}); \quad (2.115)$$

$$\hat{W} = \frac{\hbar}{m_0} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \hat{\mathbf{p}} + \frac{\hbar^2}{2m_0} (k^2 - k_0^2). \quad (2.116)$$

Tenemos que:

$$\hat{H}(\mathbf{k}_0) u_{l,\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) = \left( E_{l\mathbf{k}_0}^{(A)} Y_A + E_{l\mathbf{k}_0}^{(B)} Y_B \right) u_{l,\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}), \quad (2.117)$$

donde  $Y_A, Y_B$  son funciones escalonadas,  $Y_A(Y_B)$  vale uno si  $\mathbf{r}$  corresponde a una capa A (B). Permitiendo que  $\hat{H}(\mathbf{k})$  actúe sobre  $\psi(\mathbf{r})$  dada por (2.109) y (2.113) y siguiendo el mismo procedimiento que en el apéndice B del capítulo II de [1] se llega a que las funciones  $\chi_l^{(A,B)}(z)$  deben satisfacer el conjunto de ecuaciones de eigenvalores:

$$\mathbf{Q}^{\mathbf{k}_0} \left( z, -i \frac{\partial}{\partial z} \right) \chi = E(\mathbf{k}) \chi, \quad (2.118)$$

en una vecindad del borde  $\mathbf{k}_0$ . En esta ecuación  $\chi$  es un vector columna  $N$  dimensional cuyas componentes son las funciones  $\chi_l^{(A,B)}(z)$  y  $\mathbf{Q}^{\mathbf{k}_0}$  una matriz de orden  $N \times N$ , donde  $N$  es el número de bordes de bandas considerados en las ecuaciones (2.106) y (2.107). Los elementos matriciales  $Q_{ml}^{\mathbf{k}_0}(z, -i \frac{\partial}{\partial z})$  vienen dados por:

$$Q_{ml}^{\mathbf{k}_0} \left( z, -i \frac{\partial}{\partial z} \right) = \left[ E_{l\mathbf{k}_0}^{(A)} Y_A + E_{l\mathbf{k}_0}^{(B)} Y_B + \frac{\hbar^2}{2m_0} (k_\perp^2 - k_{0\perp}^2) - \frac{\hbar^2}{2m_0} \left( \frac{\partial^2}{\partial z^2} + k_{0z}^2 \right) \right] \delta_{ml} + \frac{\hbar}{m_0} (\mathbf{k}_\perp - \mathbf{k}_{0\perp}) \cdot \langle m | \hat{\mathbf{p}}_\perp | l \rangle - \frac{\hbar}{m_0} \langle m | \hat{p}_z | l \rangle \left( i \frac{\partial}{\partial z} + k_{0z} \right), \quad (2.119)$$

donde:

$$\langle m | \hat{\mathbf{p}} | l \rangle = \int_{\Omega_0} u_{m,\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})^* \hat{\mathbf{p}} u_{l,\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r}, \quad (2.120)$$

siendo  $\Omega_0$  la celda unitaria de la capa correspondiente.

Mientras mayor sea  $N$  en la ecuación (2.118) más exacto será el resultado. En la práctica se suele restringir  $l$  a 8, es decir a estados de la heteroestructura adjuntos a las bandas  $\Gamma_6, \Gamma_7$  y  $\Gamma_8$  del material en estudio. En la medida que otras bandas están más alejadas de los bordes de las bandas  $\Gamma_6, \Gamma_7$  y  $\Gamma_8$ , su efecto sobre las funciones envolventes relacionadas puede ser menospreciado o tenido en cuenta a través de la introducción de masas efectivas, ver capítulo II de [1]. Para simplificar el análisis consideraremos las expresiones (2.118) y (2.119).



**Matriz B**

Esta matrix solo tendrá elementos no nulos en su diagonal dados por  $-\frac{\hbar^2}{2m_0}$ . Es decir es simétrica y real y por tanto también es **hermítica**.

**Matriz P + Y**

Sus elementos no diagonales vienen dados por  $(\mathbf{P} + \mathbf{Y})_{ml} = -i\frac{\hbar}{m_0}\langle m|\hat{p}_z|l\rangle$ . Como veremos se cumple que  $\langle m|\hat{p}_z|l\rangle = \langle l|\hat{p}_z|m\rangle^*$  y por tanto  $(\mathbf{P} + \mathbf{Y})_{ml}^* = -(\mathbf{P} + \mathbf{Y})_{lm}$ .

*Demostración*

Como sabemos

$$\langle m|\hat{p}_z|l\rangle = \frac{1}{\Omega_0} \int_{\Omega_0} u_{m,\mathbf{k}_0}^*(\mathbf{r})\hat{p}_z u_{l,\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}. \quad (2.121)$$

Si además tomamos en cuenta que  $\hat{p}_z$  es formalmente hermítico, por definición, tendremos que:

$$\langle m|\hat{p}_z|l\rangle = \frac{1}{\Omega_0} \int_{\Omega_0} u_{m,\mathbf{k}_0}^*(\mathbf{r})\hat{p}_z u_{l,\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = \frac{1}{\Omega_0} \int_{\Omega_0} u_{l,\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})\hat{p}_z^* u_{m,\mathbf{k}_0}^*(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}, \quad (2.122)$$

y por otra parte

$$\langle l|\hat{p}_z|m\rangle^* = \frac{1}{\Omega_0} \int_{\Omega_0} u_{l,\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})\hat{p}_z^* u_{m,\mathbf{k}_0}^*(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \quad (2.123)$$

Entonces queda demostrado que  $\langle m|\hat{p}_z|l\rangle = \langle l|\hat{p}_z|m\rangle^*$  y por tanto  $(\mathbf{P} + \mathbf{Y})_{ml}^* = -(\mathbf{P} + \mathbf{Y})_{lm}$ .

En cuanto a los términos diagonales de  $(\mathbf{P} + \mathbf{Y})$ , es decir  $m = l$  tendríamos que:

$$\langle l|\hat{p}_z|l\rangle = \frac{1}{\Omega_0} \int_{\Omega_0} u_{l,\mathbf{k}_0}^*(\mathbf{r})\hat{p}_z u_{l,\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = \langle \hat{p}_z \rangle. \quad (2.124)$$

Es decir hablamos del valor medio de  $\hat{p}_z$  en el punto  $\mathbf{k}_0$  de la banda  $l$ . Pero  $p_z(\mathbf{k}_0) = \frac{m_z}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_l(\mathbf{k})}{\partial k_z} \Big|_{\mathbf{k}_0}$ , donde  $\varepsilon_l(\mathbf{k})$  es la relación de dispersión de la banda  $l$ . Como se sabe, si  $\mathbf{k}_0$  es un extremo, esta derivada de primer orden se anula, es decir,  $p_z$  es nulo y por ende también  $\langle \hat{p}_z \rangle$  y los elementos diagonales de  $(\mathbf{P} + \mathbf{Y})$ .

Las características analizadas indican que la matriz  $(\mathbf{P} + \mathbf{Y})$  es **antihermítica**. Nótese que  $(\text{Tr}[\mathbf{C}]) = 0$  por lo que  $\mathbf{C}$  es indefinida, es decir se cumple la condición necesaria para que los eigenvalores formen pares del tipo  $(k_\ell; -k_\ell)$ .

**Matriz W**

Los elementos diagonales de esta matrix vienen dados solo por los términos:

$E_{l\mathbf{k}_0}^{(A)} Y_A + E_{l\mathbf{k}_0}^{(B)} Y_B - E_{l\mathbf{k}}^{(A,B)} + \frac{\hbar^2}{2m_0}(k_\perp^2 - k_{0\perp}^2) - \frac{\hbar^2}{2m_0} k_{0z}^2$ . Los elementos  $\frac{\hbar}{m_0}(\mathbf{k}_\perp - \mathbf{k}_{0\perp}) \cdot \langle l|\hat{\mathbf{p}}_\perp|l\rangle$  son nulos de acuerdo con el razonamiento anterior. Entonces  $\mathbf{W}$  tendrá elementos diagonales reales. Por su parte los no diagonales tienen la forma:  $\frac{\hbar}{m_0}(\mathbf{k}_\perp - \mathbf{k}_{0\perp}) \cdot \langle m|\hat{\mathbf{p}}_\perp|l\rangle - \frac{\hbar}{m_0} k_{0z} \langle m|\hat{p}_z|l\rangle$ . Basándonos en la demostración anterior podemos decir que para estos se cumple que  $W_{ij} = W_{ji}^*$ . Estas características nos indican que la matriz  $\mathbf{W}$  es **hermítica**.

La función de Green para este modelo viene dada por la expresión (2.23).

**2.4.6 Pseudopotenciales locales-N**

El método empírico de pseudopotenciales locales es conocido por su sorprendente exactitud para calcular estructuras de bandas en materiales considerados masivos. La ventaja de este enfoque microscópico

respecto a la aproximación de la función envolvente (EFA) es su capacidad para tratar con cualquier nivel de energía de la heteroestructura, es decir tanto niveles cercanos como alejados del borde  $\Gamma$ . El modelo EFA básicamente se restringe a la vecindad de los puntos de alta simetría de la zona de Brillouin  $(\Gamma, X, L)$ .

La principal virtud del método de pseudopotenciales es que solo los electrones de valencia necesitan ser considerados. Cuando muchos materiales semiconductores forman cristales, sus electrones pueden ser divididos en electrones internos y electrones de valencia. Los primeros completan los orbitales más cercanos al núcleo (región interna) y apantallan el potencial creado por la carga total del núcleo. Como resultado puede considerarse que los electrones de valencia están sometidos a un potencial efectivo débil, o pseudopotencial. La fundamentación y la formulación matemática de dichos pseudopotenciales puede estudiarse en [50, 51]. Comentando brevemente: Se comienza expresando la función de onda real de los electrones de valencia  $\psi$  como la suma de una función suave  $\phi$  y una suma sobre los estados ocupados por los electrones internos  $\phi_t$ :  $\psi = \phi + \sum_t b_t \phi_t$ . Luego imponiendo que  $\psi$  sea ortogonal a los estados  $\phi_t$ , se tendrá que la ecuación:

$$H\psi = \left( \frac{p^2}{2m} + V_c \right) \psi = E\psi, \quad (2.125)$$

donde  $V_c$  es el potencial atractivo del núcleo, conduce a una nueva ecuación:

$$(H + V_R) \phi = E\phi, \quad (2.126)$$

donde el término  $V_R$  actúa como un potencial repulsivo de corto alcance cuyo efecto es mantener los electrones de valencia fuera de la región interna. La ecuación (2.126) es la nueva ecuación a resolver para la pseudofunción de onda  $\phi$ . Expresando el Hamiltoniano como la suma de la energía cinética y el potencial atractivo del núcleo, entonces (2.126) resulta:

$$\left( \frac{p^2}{2m} + V_c + V_R \right) \phi = \left( \frac{p^2}{2m} + V \right) \phi = E\phi, \quad (2.127)$$

donde  $V$  es el pseudopotencial.

La ecuación (2.127) puede resolverse utilizando el método del electrón cuasi libre. Teniendo en cuenta la periodicidad de la red, tanto  $\phi$  como  $V$  admiten los siguientes desarrollos de Fourier:

$$\phi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{g}} C_{\vec{g}} e^{i(\vec{k}+\vec{g})\cdot\vec{r}}; \quad (2.128)$$

$$V(\vec{r}) = \sum_{\vec{g}} V_{\vec{g}} e^{i\vec{g}\cdot\vec{r}}, \quad (2.129)$$

donde  $\vec{g}$  son vectores de la red recíproca y  $\vec{k}$  el vector de onda de la onda plana. Si existe solo un átomo por celda primitiva los coeficientes  $V_{\vec{g}}$  son conocidos como factores de forma pseudopotencial. Cuando hay diferentes átomos en la celda primitiva, es conveniente definir para cada átomo un factor de forma pseudopotencial y un factor de estructura  $S_{\vec{g}}$  el cual solamente depende de la posición de un tipo particular de átomo en la celda primitiva [51]. Por ejemplo, si se tienen dos tipos de átomos  $\alpha$  y  $\beta$  en el cristal, entonces:

$$V(\vec{r}) = \sum_{\vec{g}} (V_{\vec{g}\alpha} S_{\vec{g}\alpha} + V_{\vec{g}\beta} S_{\vec{g}\beta}) e^{i\vec{g}\cdot\vec{r}}. \quad (2.130)$$

La razón principal por la que los pseudopotenciales son tan útiles es porque un pequeño número de estos factores de forma es suficiente para calcular una estructura de bandas. En semiconductores con estructura de bandas, tales como Si y Ge, tres factores de forma son suficientes [51]. Los factores de forma pseudopotencial pueden ser determinados empíricamente [51, 52]. Sustituyendo (2.128) y (2.129) en (2.127) se obtiene una ecuación matricial secular que puede tener orden  $N \times N$  y se resuelve numéricamente por diagonalización. Los eigenvalores de la matriz son los posibles valores de energía  $E(\vec{k})$ .

El método de pseudopotenciales también ha sido aplicado a una variedad de heteroestructuras como superredes de GaAs-GaAlAs [53, 54] con el fin de determinar la estructura de bandas correspondiente. La esencia de este procedimiento es considerar un Hamiltoniano  $H_0$  apropiado para un cristal de GaAs infinito cuyas eigenfunciones y eigenvalores son  $\phi_{n,\vec{k}}$  y  $E_{n,\vec{k}}$  respectivamente ( $n$  es el índice de la banda y  $\vec{k}$  el vector de onda). Entonces la función de onda de la superred  $\psi$  se expande en términos del conjunto completo  $\phi_{n,\vec{k}}$ . El Hamiltoniano de la superred es  $H = H_0 + V$ , donde  $V$  es la diferencia entre el potencial de los átomos en las capas de GaAlAs y aquellas de GaAs. La ecuación de Schrödinger a resolver es:  $(H_0 - E + V)\psi = 0$ .

Sin embargo nuestro interés es aplicar los pseudopotenciales para obtener una forma Sturm-Liouville matricial de la ecuación de Schrödinger de la heteroestructura a partir de la cual obtener una expresión para la función de Green. Ello implica que se presuponen conocidas las energías  $E$ . La forma Sturm-Liouville matricial que buscamos se obtiene mediante el procedimiento descrito en [9] con el cual el vector 3D  $\vec{g}$  es expresado mediante su proyección 2D denotada como  $\gamma$ :  $\vec{g} = [\gamma, \lambda(\gamma)]$ . Con el mismo  $\gamma$  pueden tenerse diferentes vectores  $\vec{g}$  correspondientes a diferentes valores  $\lambda(\gamma)$ . Proyectando (2.129) se tiene que:

$$V(\vec{\rho}, z) = \sum_{\gamma} V_{\gamma}(z) e^{i\gamma \cdot \vec{\rho}}. \quad (2.131)$$

Consecuentemente la forma de  $\psi$  es:

$$\psi(\vec{\rho}, z) = \sum_{\gamma} \psi_{\vec{k}+\gamma}(z) e^{i(\vec{k}+\gamma) \cdot \vec{\rho}}. \quad (2.132)$$

El Hamiltoniano se convierte entonces en la matriz diferencial de elementos:

$$H_{\gamma,\gamma'}(z) = \frac{\hbar^2}{2m} (\kappa^2 - \frac{d^2}{dz^2}) \delta_{\gamma,\gamma'} + V_{\gamma-\gamma'}(z). \quad (2.133)$$

La función de onda entonces se convierte en el vector  $\psi_{\vec{k}}(z)$  de componentes  $\psi_{\vec{k}+\gamma'}(z)$  que satisface el sistema diferencial:

$$\sum_{\gamma'} [E \delta_{\gamma,\gamma'} - H_{\gamma,\gamma'}] \psi_{\vec{k}+\gamma'}(z) = \mathbf{0}, \quad (2.134)$$

o lo que es igual:

$$\sum_{\gamma'} \left[ \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} \delta_{\gamma,\gamma'} + (E - \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m}) \delta_{\gamma,\gamma'} - V_{\gamma-\gamma'}(z) \right] \psi_{\vec{k}+\gamma'}(z) = \mathbf{0}. \quad (2.135)$$

Claramente estamos en presencia de un caso  $\mathbf{P} + \mathbf{Y} = \mathbf{0}$ , de manera que los eigenvalores aparecen por pares del tipo  $(k_{\ell}; -k_{\ell})$ . Los elementos de la matriz  $\mathbf{B}$  vienen dados por  $\frac{\hbar^2}{2m} \delta_{\gamma,\gamma'}$  de manera que  $\mathbf{B}$  es simétrica. Los elementos  $\mathbf{W}_{\gamma,\gamma'} = (E - \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m}) \delta_{\gamma,\gamma'} - V_{\gamma-\gamma'}(z)$  y la matriz  $\mathbf{W}$  será hermítica si tenemos en cuenta que los elementos  $V_{\gamma-\gamma'}(z)$  deben permitir que la matriz  $H_{\gamma,\gamma'}(z)$  (2.133) sea hermítica para que las energías  $E$  sean reales.

A este problema le aplica la expresión (2.20) para determinar  $\mathbf{G}(z, z')$ .

## 2.5 Función $\mathbf{G}(z, z')$ en un medio con pérdidas

### 2.5.1 Modos electromagnéticos en un medio isotrópico conductor

Considérese la propagación de una onda electromagnética en un sistema isotrópico lineal multicapas compuesto de materiales conductores. A modo de ejemplo, trataremos el problema abordado en la sección 5.3.3. Las ecuaciones para las componentes transversales del campo eléctrico  $E_1 = E_x$  y  $E_2 = E_y$

vienen dadas por las ecuaciones (5.141) y (5.142) respectivamente. Ambas ecuaciones pueden ser tratadas como dos ESLM independientes (con  $N=1$ ), y son útiles para obtener una función de Green en el caso de un medio conductor donde se consideran las pérdidas óhmicas. Utilicemos la ecuación para  $E_1$ :

$$\frac{d}{dz} \left[ \frac{1}{\mu(z)} \frac{dE_1(z)}{dz} \right] + E_1(z) \left[ \omega^2 \left( \epsilon(z) + i \frac{\sigma(z)}{\omega} \right) - \frac{\kappa^2}{\mu(z)} \right] = 0, \quad (2.136)$$

donde  $\epsilon$  es la permitividad del medio,  $\mu$  la permeabilidad magnética,  $\sigma$  la conductividad eléctrica y  $\kappa = \kappa_y$  y depende del ángulo de incidencia de la onda respecto al eje  $z$ . Este es un caso  $\mathbf{P} = \mathbf{Y} = 0$  donde:

$$\mathbf{B} = b = \frac{1}{\mu(z)} \quad (2.137)$$

$$\mathbf{W} = w = \omega^2 \left( \epsilon(z) + i \frac{\sigma(z)}{\omega} \right) - \frac{\kappa^2}{\mu(z)} \quad (2.138)$$

Nótese que en este caso no se cumplen todas las condiciones que garantizan la hermiticidad formal del operador  $\mathbf{L}$  ( $\mathbf{B}^\dagger = \mathbf{B}$ ,  $\mathbf{W}^\dagger = \mathbf{W}$  and  $\mathbf{Y} = -\mathbf{P}^\dagger$ ) debido a que  $w \neq w^*$  y por tanto  $\mathbf{W}^\dagger \neq \mathbf{W}$ .

Considerando el medio homogéneo, la ecuación (2.136) tiene eigenvalores:  $k_1 = k$  y  $k_2 = -k$ :

$$k = +\sqrt{\omega^2 \mu \left( \epsilon + i \frac{\sigma}{\omega} \right) - \kappa^2}. \quad (2.139)$$

La función de Green vendrá dada por la expresión (2.42):

$$G(z, z') = -\frac{i}{2bk} e^{ik|z-z'|}, \quad (2.140)$$

donde  $b = 1/\mu$ .

## 2.5.2 Modos elásticos en un medio viscoso. Cristal isotrópico

En un sólido donde se consideran las pérdidas por viscosidad, la ecuación de la onda elástica viene dada por la ecuación [41]:

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = c_{ijkl} \frac{\partial^2 u_l}{\partial x_j \partial x_k} + \eta_{ijkl} \frac{\partial^3 u_l}{\partial x_j \partial x_k \partial t}. \quad (2.141)$$

Nótese que es la ecuación (M.1) del apéndice M pero con un término adicional que considera las pérdidas y en el cual  $\eta_{ijkl}$  es el tensor de viscosidad. Ambos tensores ( $\eta_{ijkl}$  y  $c_{ijkl}$ ) presentan igual número de componentes independientes debido a que para ambos aplican las mismas restricciones derivadas de la simetría del cristal.

Como se indicó en la sección 2.4.2 (Modos elásticos sagitales) para el medio isotrópico el vector de onda  $\vec{\kappa}$  puede seleccionarse en la forma  $\vec{\kappa} = (0, \kappa_y)$  y el sistema original de tres ecuaciones diferenciales acopladas se desacopla en una ecuación para la onda transversal horizontal (sección 2.4.1) y en un sistema de dos ecuaciones diferenciales acopladas que describe el movimiento de la onda elástica sagital cuyas amplitudes acopladas son  $u_y$  y  $u_z$ . Debido a que al tensor  $\eta_{ijkl}$  le aplican las mismas restricciones por simetría que al tensor  $c_{ijkl}$  los cálculos indican que para el medio viscoso podemos utilizar las mismas expresiones del medio no viscoso con solo sustituir los elementos  $c_{ijkl}$  por los elementos  $c_{ijkl} + i\omega\eta_{ijkl}$ . Partiendo de las expresiones dadas en (2.62) tendremos que:

$$\begin{aligned} \mathbf{B} &= \begin{pmatrix} \mu + i\omega\eta_{66} & 0 \\ 0 & \Gamma + i\omega\eta_{11} \end{pmatrix}; & \mathbf{P} &= i \begin{pmatrix} 0 & \kappa_y(\mu + i\omega\eta_{66}) \\ \kappa_y(\lambda + i\omega\eta_{12}) & 0 \end{pmatrix}; \\ \mathbf{Y} &= i \begin{pmatrix} 0 & \kappa_y(\lambda + i\omega\eta_{12}) \\ \kappa_y(\mu + i\omega\eta_{66}) & 0 \end{pmatrix}; & \mathbf{W} &= \begin{pmatrix} (\Gamma + i\omega\eta_{11}) q_L^2 & 0 \\ 0 & (\mu + i\omega\eta_{66}) q_T^2 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (2.142)$$

donde

$$q_L = +\sqrt{\left(\frac{\omega}{v_L}\right)^2 - \kappa_y^2}; \quad v_L = \sqrt{\frac{\Gamma + i\omega\eta_{11}}{\rho}}; \quad (2.143)$$

$$q_T = +\sqrt{\left(\frac{\omega}{v_T}\right)^2 - \kappa_y^2}; \quad v_T = \sqrt{\frac{\mu + i\omega\eta_{66}}{\rho}}. \quad (2.144)$$

Nótese que ya no se cumplen las condiciones que garantizan la hermiticidad formal del operador  $\mathbf{L}$  ( $\mathbf{B}^\dagger = \mathbf{B}$ ,  $\mathbf{W}^\dagger = \mathbf{W}$  and  $\mathbf{Y} = -\mathbf{P}^\dagger$ ). Sin embargo los eigenvalores forman pares del tipo  $(k_\ell, -k_\ell)$ :  $k_1 = +q_L$ ,  $k_2 = -q_L$ ,  $k_3 = +q_T$ ,  $k_4 = -q_T$ , lo que implica que la expresión (2.23) es aplicable en este caso. Por tanto la función de Green para los modos elásticos sagitales en un medio viscoso vendrá dada por las expresiones (2.65)-(2.67) solo hay que tener en cuenta que ahora  $q_L$  y  $q_T$  vienen dados por (2.143) y (2.144) respectivamente.

La validez de  $\mathbf{G}(z, z')$  fue verificada analíticamente en el problema de los modos elásticos sagitales (sección 2.4.2) por tanto en presencia de viscosidad la verificación es inmediata.

## Capítulo 3

# Matrices de transferencia y sus relaciones

Esta sección se centra en aquellas matrices que consideramos básicas para el estudio de diversas excitaciones elementales en heteroestructuras, así como en las relaciones entre ellas. Las correspondientes definiciones serán planteadas haciendo uso de la nomenclatura adoptada en [8]. Las relaciones entre matrices será la herramienta por medio de la cual se explicará porqué algunas variantes del método de la matriz de transferencia evaden la inestabilidad numérica conocida como problema  $\Omega - d$ . Debido a que los análisis de la estabilidad numérica se realizarán en el marco general de la ecuación maestra, las variantes que resulten numéricamente estables lo serán también para cualquier problema cuya ecuación de movimiento sea un caso particular de dicha ecuación.

### 3.1 Definiciones y propiedades básicas

En las definiciones de las matrices introducimos el símbolo  $\alpha$  para representar un dominio de la heteroestructura. Para el sistema representado en la figura 1.1,  $\alpha$  puede ser cualquiera de los  $m$  dominios la heteroestructura, con  $m = 1, \dots, \mu$ , e incluso los dominios externos L, R. Para cualquier dominio  $\alpha$ , finito o infinito, se considerará el *medio extendido*  $\alpha$  en el sentido descrito en la sección 2.1. Es decir, el medio extendido  $\alpha$  es un medio infinito que consiste en el dominio  $\alpha$ , con exactamente el mismo material que lo constituye, y que más allá del límite o de los límites del dominio  $\alpha$  puede ser definido arbitrariamente según convenga.

Sea  $\mathbf{F}(\alpha : z)$  una solución del sistema diferencial que describe el medio extendido  $\alpha$ . Con  $(\alpha : z)$  se denota cualquier punto  $z$  en el mencionado medio extendido.

#### 3.1.1 Matriz de transferencia completa ( $\mathbf{M}$ )

La matriz de transferencia completa, denotada como  $\mathbf{M}(\alpha : z, z_0)$  (*Full transfer matrix*, en inglés), transfiere la amplitud  $\mathbf{F}$  y su derivada  $\mathbf{F}'$  de  $z_0$  a  $z$ :

$$\begin{vmatrix} \mathbf{F}(\alpha : z) \\ \mathbf{F}'(\alpha : z) \end{vmatrix} = \mathbf{M}(\alpha : z, z_0) \cdot \begin{vmatrix} \mathbf{F}(\alpha : z_0) \\ \mathbf{F}'(\alpha : z_0) \end{vmatrix}. \quad (3.1)$$

Debido a que  $\mathbf{F}$  es un vector de  $N$  componentes, la matriz  $\mathbf{M}$  tiene orden  $2N \times 2N$ . Por la misma razón el resto de las matrices que se definirán también tienen orden  $2N \times 2N$ . Aplicando el procedimiento

algebraico y analítico del apéndice G se obtiene que:

$$\mathbf{M}(z, z_0) = \mathbf{N}(z) \cdot \mathbf{N}(z_0)^{-1}, \quad (3.2)$$

con:

$$\mathbf{N}(z) = \begin{vmatrix} \mathbf{F}_1(z) & \mathbf{F}_2(z) & \dots & \mathbf{F}_{2N}(z) \\ \mathbf{F}'_1(z) & \mathbf{F}'_2(z) & \dots & \mathbf{F}'_{2N}(z) \end{vmatrix}. \quad (3.3)$$

Obviamente si  $z = z_0$  se tiene que:

$$\mathbf{M}(z, z) = \mathbf{I}_{2N}. \quad (3.4)$$

Se ha denotado con  $\mathbf{I}_{2N}$  la matriz identidad de orden  $2N \times 2N$ . Por otra parte, las ecuaciones (3.1) y (3.2) prueban una propiedad importante: La ecuación (3.2) conduce a una única matriz  $\mathbf{M}(z, z_0)$  independientemente de la base de soluciones LI seleccionada.

Si  $z_0 < z_1 < z_2$  y ambas  $\mathbf{F}(z)$  y  $\mathbf{F}'(z)$  son continuas en  $z_1$ , entonces  $\mathbf{M}$  cumple la regla de la cadena:

$$\mathbf{M}(z_2, z_0) = \mathbf{M}(z_2, z_1) \cdot \mathbf{M}(z_1, z_0). \quad (3.5)$$

Sin embargo, con frecuencia  $\mathbf{F}'(z)$  no es continua y en dicho caso se introduce una matriz de acople que compensa la discontinuidad de  $\mathbf{F}'(z)$  [8].

### 3.1.2 Matriz de transferencia asociada ( $\mathbf{T}$ )

La matriz de transferencia asociada denotada como  $\mathbf{T}(\alpha : z, z_0)$  o simplemente  $\mathbf{T}$  transfiere la amplitud  $\mathbf{F}$  y la forma diferencial lineal  $\mathbf{A}$ , definida en (1.2) de la coordenada  $z_0$  a la coordenada  $z$ . Es decir:

$$\begin{vmatrix} \mathbf{F}(\alpha : z) \\ \mathbf{A}(\alpha : z) \end{vmatrix} = \mathbf{T}(\alpha : z, z_0) \cdot \begin{vmatrix} \mathbf{F}(\alpha : z_0) \\ \mathbf{A}(\alpha : z_0) \end{vmatrix}; \quad (3.6)$$

$$\mathbf{A}(\alpha : z) = \mathbf{B}(\alpha : z) \cdot \mathbf{F}'(\alpha : z) + \mathbf{P}(\alpha : z) \cdot \mathbf{F}(\alpha : z).$$

En adelante, el argumento zonal  $\alpha$  podrá suprimirse convenientemente para simplificar las expresiones. Considerando el procedimiento algebraico y analítico descrito en el apéndice G la matriz  $\mathbf{T}(\alpha : z, z_0)$  puede expresarse en la forma:

$$\mathbf{T}(z, z_0) = \mathbf{Q}(z) \cdot \mathbf{Q}(z_0)^{-1}, \quad (3.7)$$

donde la matriz auxiliar  $\mathbf{Q}(z)$  se compone de una base de soluciones LI de la ESLM y de las formas diferenciales lineales correspondientes:

$$\mathbf{Q}(z) = \begin{vmatrix} \mathbf{F}_1(z) & \mathbf{F}_2(z) & \dots & \mathbf{F}_{2N}(z) \\ \mathbf{A}_1(z) & \mathbf{A}_2(z) & \dots & \mathbf{A}_{2N}(z) \end{vmatrix}. \quad (3.8)$$

Si el medio es homogéneo la base de soluciones LI suele componerse de las eigenfunciones  $\mathbf{F}_\ell(z)$  del QEP (sección 2.2). Consideremos que el medio extendido  $\alpha$  es homogéneo y llamemos  $d$  al espesor dado por  $d = z - z_0$ . Entonces teniendo en cuenta la expresión  $\mathbf{F}_\ell(z) = \mathbf{F}_{0\ell} \exp[ik_\ell z]$  ( $\ell = 1, 2, \dots, 2N$ ) para las eigenfunciones, la expresión (3.7) puede reescribirse en la forma (apéndice H):

$$\mathbf{T}(z, z_0) = \mathbf{T}(d) = \begin{vmatrix} \mathbf{F}_{0(N)} & \mathbf{F}_{0(2N)} \\ \mathbf{A}_{0(N)} & \mathbf{A}_{0(2N)} \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} \mathbf{\Pi}_{k_N}(d) & \mathbf{0}_N \\ \mathbf{0}_N & \mathbf{\Pi}_{k_{2N}}(d) \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} \mathbf{F}_{0(N)} & \mathbf{F}_{0(2N)} \\ \mathbf{A}_{0(N)} & \mathbf{A}_{0(2N)} \end{vmatrix}^{-1}. \quad (3.9)$$

donde  $\mathbf{A}_{0(N)}$ ,  $\mathbf{A}_{0(2N)}$ ,  $\mathbf{F}_{0(N)}$  y  $\mathbf{F}_{0(2N)}$  son particiones de orden  $N \times N$ . Las particiones  $\mathbf{\Pi}_{k_N}(d)$  y  $\mathbf{\Pi}_{k_{2N}}(d)$  son matrices diagonales de orden  $N \times N$  cuyos elementos son exponenciales de argumento  $ik_\ell d$ ;  $\ell = 1, 2, \dots, N$  para la primera y  $\ell = N + 1, N + 2, \dots, 2N$  para la segunda, ver apéndice H. Con  $\mathbf{0}_N$  denotamos la matriz nula de orden  $N \times N$ .

Obviamente si  $z = z_0$  se tiene que:

$$\mathbf{T}(z, z) = \mathbf{I}_{2N} \quad (3.10)$$

La expresión (3.9) será utilizada para analizar la estabilidad numérica de la matrix  $\mathbf{T}$  pero también permite determinar de forma directa una propiedad importante de esta matrix. Recordemos que bajo las condiciones generales de hermiticidad formal del operador  $\mathbf{L}$  ( $\mathbf{B}^\dagger = \mathbf{B}$ ,  $\mathbf{W}^\dagger = \mathbf{W}$  and  $\mathbf{Y} = -\mathbf{P}^\dagger$ ) los eigenvalores  $k_\ell$  pueden ser reales o aparecer en pares del tipo  $k_\ell$  y su complejo conjugado  $k_\ell^*$  (sección 2.2). Entonces de (3.9) se puede concluir directamente que bajo las condiciones mencionadas el determinante de  $\mathbf{T}$  es unimodular sino es uno. Si tenemos en cuenta que para los problemas analizados en esta tesis (capítulo 2 y 5) los eigenvalores aparecen por pares del tipo  $(k_\ell, -k_\ell)$  entonces se obtiene directamente que  $\text{Det}[\mathbf{T}] = 1$ . Esta propiedad también se cumple para el caso en que el dominio  $\alpha$  no sea homogéneo, es decir, cuando los coeficientes  $\mathbf{B}(z)$ ,  $\mathbf{P}(z)$ ,  $\mathbf{Y}(z)$  y  $\mathbf{W}(z)$  dependen de  $z$ . Haciendo uso de un teorema de la teoría de ecuaciones diferenciales llamado unas veces de Liouville y otras de Jacobi, en la sección 2.7 de [8] se obtuvo la siguiente expresión:

$$\text{Det}[\mathbf{T}(z, z_0)] = e^{\int_{z_0}^z dz \text{Tr}[\mathbf{D}(z)]}; \quad \text{Tr}[\mathbf{D}(z)] = -\text{Tr}[\mathbf{B}(z)^{-1} \cdot \{\mathbf{P}(z) + \mathbf{Y}(z)\}], \quad (3.11)$$

en la que  $\text{Tr}[\mathbf{D}(z)]$  significa traza de la matrix  $\mathbf{D}(z)$ . Si las condiciones de hermiticidad formal del operador  $\mathbf{L}$  se cumplen, entonces la traza  $\text{Tr}[\mathbf{D}(z)]$  se convierte en imaginaria y se puede escribir  $\text{Det}[\mathbf{T}(z, z_0)] = e^{i\Theta(z)}$  donde  $\Theta(z)$  es real y en consecuencia el determinante de la matrix  $\mathbf{T}$  es unimodular. En adición a esto si  $\text{Tr}[\mathbf{D}(z)] = 0$  entonces  $\text{Det}[\mathbf{T}] = 1$ . Como se muestra en el capítulo 5 este resultado puede ser utilizado en la práctica para realizar el seguimiento de calidad numérica de los cálculos cuando el argumento  $ik_\ell d$  crece.

Por otra parte, las ecuaciones (3.6) and (3.7) prueban una propiedad importante: Para una ESLM dada, la ecuación (3.7) conduce a una única matrix  $\mathbf{T}$  independientemente de la base de soluciones LI seleccionada. Esta propiedad de  $\mathbf{T}$  también resultará útil en el análisis de la estabilidad numérica de algunas variantes de esta matrix.

Dada la continuidad de la forma diferencial lineal  $\mathbf{A}(z)$  en todo  $z$  a través de la heteroestructura (sección 1.1) podemos afirmar que la matrix  $\mathbf{T}$  posee la propiedad de la regla de la cadena, esto es, si  $z_0 < z_1 < z_2$  entonces:

$$\mathbf{T}(z_2, z_0) = \mathbf{T}(z_2, z_1) \cdot \mathbf{T}(z_1, z_0). \quad (3.12)$$

Luego para la heteroestructura representada en la figura 1.1 la matrix  $\mathbf{T}$  se obtiene a partir del siguiente producto de matrices:

$$\mathbf{T}(z_R, z_L) = \mathbf{T}(z_R - z_{\mu-1}) \dots \mathbf{T}(z_2 - z_1) \cdot \mathbf{T}(z_1 - z_L), \quad (3.13)$$

donde  $z_L, z_1, z_2, \dots, z_R$  son las coordenadas de las intercaras que empalman los diferentes dominios de la estructura multicapas.

### 3.1.3 Matrices de transferencia de coeficientes ( $\mathbf{K}$ )

La matrix de transferencia de coeficientes (*Coefficient transfer matrix*, en inglés), la denotamos formalmente  $\mathbf{K}(\alpha', \alpha)$ , y en forma abreviada  $\mathbf{K}$ . Este tipo de matrix tiene un caracter diferente, ahora están involucrados dos dominios diferentes  $\alpha'$  y  $\alpha$ . Se asume que ambos dominios pueden ser tratados



analíticamente, es decir se conocen las bases de amplitudes  $\mathbf{F}_\ell(\alpha' : z)$  y  $\mathbf{F}_\ell(\alpha : z)$ , de manera que:

$$\mathbf{F}(\alpha : z) = \sum_{\ell}^{2N} a_{\ell}(\alpha) \mathbf{F}_{\ell}(\alpha : z); \quad (3.14)$$

$$\mathbf{F}(\alpha' : z) = \sum_{\ell}^{2N} a_{\ell}(\alpha') \mathbf{F}_{\ell}(\alpha' : z). \quad (3.15)$$

Sea  $\mathbf{a}(\alpha)$  el vector formado por los coeficientes de expansión  $a_{\ell}(\alpha)$ . Entonces:

$$\mathbf{a}(\alpha') = \mathbf{K}(\alpha', \alpha) \cdot \mathbf{a}(\alpha). \quad (3.16)$$

Por tanto, la matriz  $\mathbf{K}(\alpha', \alpha)$  transfiere el conjunto de coeficientes  $a_{\ell}$  del dominio  $\alpha$  al dominio  $\alpha'$ . Definamos el vector:

$$\Psi(z) = \begin{vmatrix} \mathbf{F}(z) \\ \mathbf{A}(z) \end{vmatrix}. \quad (3.17)$$

Por medio del esquema de la figura 1.2 se puede plantear [8]:

$$\Psi(z) = \begin{cases} \mathbf{Q}(\mathbf{L} : z) \cdot \mathbf{a}(\mathbf{L}) & z \leq z_L \\ \mathbf{T}(z, z_L) \cdot \Psi(z_L) & z_L \leq z \leq z_R \\ \mathbf{Q}(\mathbf{R} : z) \cdot \mathbf{a}(\mathbf{R}) & z \geq z_R \end{cases} \quad (3.18)$$

Debido a que  $\Psi$  es continua en  $z_L$  y  $z_R$ , considerando la definición (3.16) se obtiene la expresión:

$$\mathbf{K}(\mathbf{R}, \mathbf{L}) = \mathbf{Q}(\mathbf{R} : z_R)^{-1} \cdot \mathbf{T}(z_R, z_L) \cdot \mathbf{Q}(\mathbf{L} : z_L), \quad (3.19)$$

la cual conduce a una ecuación para la matriz  $\mathbf{K}$  a partir del esquema  $\mathbf{T}$ . De esta expresión tenemos que, a diferencia de  $\mathbf{T}$ , la matriz  $\mathbf{K}$  si depende de la base de soluciones LI seleccionada. El determinante de  $\mathbf{K}$  dependerá del sistema diferencial y de la base seleccionada, por ejemplo, si los dominios L y R se componen del mismo material, con el uso de la base apropiada es fácil demostrar (apéndice Q) que la matriz  $\mathbf{K}$  construida en la sección 5.6.4 tiene determinante igual a uno. En dicho caso este resultado es utilizado para realizar el seguimiento de calidad numérica de los cálculos.

Si no hay región M es decir  $z_L = z_R = \bar{z}$  entonces:

$$\mathbf{K}(\mathbf{R}, \mathbf{L}) = \mathbf{Q}(\mathbf{R} : \bar{z})^{-1} \cdot \mathbf{Q}(\mathbf{L} : \bar{z}). \quad (3.20)$$

Esta expresión es útil para determinar la matriz que transfiere coeficientes a ambos lados de una intercara.

Consideremos un segmento de la heteroestructura consistente en tres dominios empalmados que denotaremos  $\alpha_0$ ,  $\alpha_1$  y  $\alpha_2$ . De acuerdo con (3.16) se tendrá que:

$$\mathbf{a}(\alpha_1) = \mathbf{K}(\alpha_1, \alpha_0) \cdot \mathbf{a}(\alpha_0); \quad (3.21)$$

$$\mathbf{a}(\alpha_2) = \mathbf{K}(\alpha_2, \alpha_1) \cdot \mathbf{a}(\alpha_1) \quad (3.22)$$

Por tanto:

$$\mathbf{a}(\alpha_2) = \mathbf{K}(\alpha_2, \alpha_1) \cdot \mathbf{K}(\alpha_1, \alpha_0) \cdot \mathbf{a}(\alpha_0). \quad (3.23)$$

De aquí que la matriz  $\mathbf{K}$  que relaciona los coeficientes del dominio  $\alpha_2$  con los del dominio  $\alpha_0$  resulta:

$$\mathbf{K}(\alpha_2, \alpha_0) = \mathbf{K}(\alpha_2, \alpha_1) \cdot \mathbf{K}(\alpha_1, \alpha_0). \quad (3.24)$$

Luego para la heteroestructura representada en la figura 1.1 la matriz  $\mathbf{K}(\mathbf{R}, \mathbf{L})$  se obtiene a partir del siguiente producto de matrices:

$$\mathbf{K}(\mathbf{R}, \mathbf{L}) = \mathbf{K}(\mathbf{R}, \mu) \dots \mathbf{K}(2, 1) \cdot \mathbf{K}(1, \mathbf{L}). \quad (3.25)$$

### 3.1.4 Matrices de dispersión ( $\mathbf{S}$ )

El término matriz de dispersión (*Scattering matrix*, en inglés) es ampliamente utilizado en la literatura y puede ser definido de formas diferentes. Como se mencionó al inicio de este capítulo, se hará uso de la nomenclatura adoptada en [8]. Sea  $\mathbf{a}^{+/-}(\alpha)$  el vector compuesto por los  $N$  coeficientes  $a_\ell(\alpha)$  correspondientes a las amplitudes que se propagan hacia la derecha/izquierda en el dominio  $\alpha$ . Consideramos heteroestructuras con la configuración  $L - M - R$ , luego:

$$\begin{vmatrix} \mathbf{a}^-(L) \\ \mathbf{a}^+(R) \end{vmatrix} = \mathbf{S}(R;L) \cdot \begin{vmatrix} \mathbf{a}^+(L) \\ \mathbf{a}^-(R) \end{vmatrix}. \quad (3.26)$$

En el marco de la teoría de dispersión decimos que la matriz  $\mathbf{S}(R;L)$  o simplemente  $\mathbf{S}$  relaciona los coeficientes de las ondas salientes de  $M$  en términos de los coeficientes de las ondas entrantes. A partir de (3.16) podemos plantear:

$$\begin{vmatrix} \mathbf{a}^+(R) \\ \mathbf{a}^-(R) \end{vmatrix} = \mathbf{K}(R;L) \cdot \begin{vmatrix} \mathbf{a}^+(L) \\ \mathbf{a}^-(L) \end{vmatrix}. \quad (3.27)$$

Luego escribiendo explícitamente (3.26) y (3.27) e identificando los términos apropiados se podrá obtener, mediante operaciones algebraicas simples la relación:

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} -[\mathbf{K}_{22}]^{-1} \cdot \mathbf{K}_{21} & [\mathbf{K}_{22}]^{-1} \\ \mathbf{K}_{11} - \mathbf{K}_{12} \cdot [\mathbf{K}_{22}]^{-1} \cdot \mathbf{K}_{21} & \mathbf{K}_{12} \cdot [\mathbf{K}_{22}]^{-1} \end{bmatrix}. \quad (3.28)$$

Aquí  $\mathbf{K}_{11}$ ,  $\mathbf{K}_{12}$ ,  $\mathbf{K}_{21}$  y  $\mathbf{K}_{22}$  son las particiones matriciales  $N \times N$  de  $\mathbf{K}$ .

### 3.1.5 Matriz de rigidez $\mathbf{E}$ , matriz de admitancia $\mathbf{L}_c$ y la matriz híbrida $\mathbf{H}$

#### Matriz de rigidez y matriz de admitancia

Partiendo de la definición (3.6) es posible definir nuevas matrices en el dominio  $\alpha$  con solo modificar el arreglo inicial de los vectores  $\mathbf{F}(z)$ ,  $\mathbf{A}(z)$ ,  $\mathbf{F}(z_0)$  y  $\mathbf{A}(z_0)$ . De esta forma se obtienen dos matrices muy conocidas a las que llamaremos matriz de rigidez (o *stiffness matrix* en inglés) y matriz de admitancia (*Compliance matrix*, en inglés) que realmente es la matriz inversa de la primera. Ambas matrices han sido ampliamente utilizadas en estudios de ondas elásticas [16, 28, 29, 31]. El nombre matriz de rigidez (*stiffness*) a la que denotaremos  $\mathbf{E}(\alpha : z, z_0)$ , en forma simplificada  $\mathbf{E}$ , surge de su uso en la teoría de ondas elásticas, donde esta expresa las tensiones en términos de la deformación:

$$\begin{vmatrix} \mathbf{A}(\alpha : z_0) \\ \mathbf{A}(\alpha : z) \end{vmatrix} = \mathbf{E}(\alpha : z, z_0) \cdot \begin{vmatrix} \mathbf{F}(\alpha : z_0) \\ \mathbf{F}(\alpha : z) \end{vmatrix}. \quad (3.29)$$

En el marco de los problemas elásticos, las componentes de la forma diferencial lineal  $\mathbf{A}$  son las componentes normales de la tensión, ver por ejemplo, el problema elástico analizado en la sección 5.2.

Aplicando para el caso de la matriz  $\mathbf{E}(z, z_0)$  el procedimiento algebraico y analítico del apéndice G tendremos que:

$$\mathbf{E}(z, z_0) = \begin{vmatrix} \mathbf{A}_1(z_0) & \mathbf{A}_2(z_0) & \dots & \mathbf{A}_{2N}(z_0) \\ \mathbf{A}_1(z) & \mathbf{A}_2(z) & \dots & \mathbf{A}_{2N}(z) \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} \mathbf{F}_1(z_0) & \mathbf{F}_2(z_0) & \dots & \mathbf{F}_{2N}(z_0) \\ \mathbf{F}_1(z) & \mathbf{F}_2(z) & \dots & \mathbf{F}_{2N}(z) \end{vmatrix}^{-1}. \quad (3.30)$$

Para un dominio homogéneo de espesor  $d = z - z_0$  esta matriz puede expresarse en la forma (apéndice I):

$$\mathbf{E}(d) = \begin{vmatrix} \mathbf{A}_{0(N)} & \mathbf{A}_{0(2N)} \cdot \mathbf{\Pi}_{k_{2N}}(-d) \\ \mathbf{A}_{0(N)} \cdot \mathbf{\Pi}_{k_N}(d) & \mathbf{A}_{0(2N)} \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} \mathbf{F}_{0(N)} & \mathbf{F}_{0(2N)} \cdot \mathbf{\Pi}_{k_{2N}}(-d) \\ \mathbf{F}_{0(N)} \cdot \mathbf{\Pi}_{k_N}(d) & \mathbf{F}_{0(2N)} \end{vmatrix}^{-1}, \quad (3.31)$$

donde  $\mathbf{A}_{0(N)}$ ,  $\mathbf{A}_{0(2N)}$ ,  $\mathbf{F}_{0(N)}$  y  $\mathbf{F}_{0(2N)}$  son particiones de orden  $N \times N$ . Las matrices  $\mathbf{\Pi}_{k_N}(d)$  y  $\mathbf{\Pi}_{k_{2N}}(d)$  son las mismas que en el caso de la expresión (3.9). La matriz de admitancia, la que denotaremos en forma simplificada  $\mathbf{L}_c$ , es la inversa de  $\mathbf{E}$  por tanto:

$$\mathbf{L}_c(d) = \left| \begin{array}{cc} \mathbf{F}_{0(N)} & \mathbf{F}_{0(2N)} \cdot \mathbf{\Pi}_{k_{2N}}(-d) \\ \mathbf{F}_{0(N)} \cdot \mathbf{\Pi}_{k_N}(d) & \mathbf{F}_{0(2N)} \end{array} \right| \cdot \left| \begin{array}{cc} \mathbf{A}_{0(N)} & \mathbf{A}_{0(2N)} \cdot \mathbf{\Pi}_{k_{2N}}(-d) \\ \mathbf{A}_{0(N)} \cdot \mathbf{\Pi}_{k_N}(d) & \mathbf{A}_{0(2N)} \end{array} \right|^{-1}. \quad (3.32)$$

De estas expresiones se ve claramente que si  $d = 0$  la matriz de la derecha no es invertible debido a que contiene filas y columnas repetidas, por tanto en dicho caso los cálculos (3.31) y (3.32) conducen a una singularidad numérica.

### Matriz híbrida

Una variante menos conocida se obtiene de un arreglo particular de los vectores  $\mathbf{F}(z)$ ,  $\mathbf{A}(z)$ ,  $\mathbf{F}(z_0)$  y  $\mathbf{A}(z_0)$  en (3.6). Dicha matriz se denomina matriz híbrida y la denotaremos como  $\mathbf{H}(\alpha : z, z_0)$ , de forma simplificada  $\mathbf{H}$ :

$$\left| \begin{array}{c} \mathbf{F}(\alpha : z_0) \\ \mathbf{A}(\alpha : z) \end{array} \right| = \mathbf{H}(\alpha : z; z_0) \cdot \left| \begin{array}{c} \mathbf{A}(\alpha : z_0) \\ \mathbf{F}(\alpha : z) \end{array} \right|. \quad (3.33)$$

Aplicando para el caso de  $\mathbf{H}(z, z_0)$  el procedimiento algebraico y analítico del apéndice G se tiene que:

$$\mathbf{H}(z, z_0) = \left| \begin{array}{cccc} \mathbf{F}_1(z_0) & \mathbf{F}_2(z_0) & \dots & \mathbf{F}_{2N}(z_0) \\ \mathbf{A}_1(z) & \mathbf{A}_2(z) & \dots & \mathbf{A}_{2N}(z) \end{array} \right| \cdot \left| \begin{array}{cccc} \mathbf{A}_1(z_0) & \mathbf{A}_2(z_0) & \dots & \mathbf{A}_{2N}(z_0) \\ \mathbf{F}_1(z) & \mathbf{F}_2(z) & \dots & \mathbf{F}_{2N}(z) \end{array} \right|^{-1} \quad (3.34)$$

La matriz híbrida fue definida en [16] como variante numéricamente estable para estudiar la propagación de ondas acústicas en un sistema a capas anisotrópico. En este trabajo la estamos definiendo para el caso general de un sistema de ecuaciones Sturm-Liouville matricial.

Considérese un dominio homogéneo de espesor  $d = z - z_0$ . Realizando un procedimiento análogo al expuesto en el apéndice I esta matriz puede expresarse en la forma:

$$\mathbf{H}(d) = \left| \begin{array}{cc} \mathbf{F}_{0(N)} & \mathbf{F}_{0(2N)} \cdot \mathbf{\Pi}_{k_{2N}}(-d) \\ \mathbf{A}_{0(N)} \cdot \mathbf{\Pi}_{k_N}(d) & \mathbf{A}_{0(2N)} \end{array} \right| \cdot \left| \begin{array}{cc} \mathbf{A}_{0(N)} & \mathbf{A}_{0(2N)} \cdot \mathbf{\Pi}_{k_{2N}}(-d) \\ \mathbf{F}_{0(N)} \cdot \mathbf{\Pi}_{k_N}(d) & \mathbf{F}_{0(2N)} \end{array} \right|^{-1}. \quad (3.35)$$

En [16] se le da el nombre de matriz stiffness-compliance híbrida o simplemente matriz híbrida porque sus elementos son una mezcla elementos de la matriz de rigidez  $\mathbf{E}$  y de su inversa, la matriz de compliance  $\mathbf{L}_c$ . Sin embargo, a diferencia de estas matrices, la matriz  $\mathbf{H}$  converge sin problemas cuando  $d \rightarrow 0$ . Después de un poco de trabajo algebraico con bloques matriciales, de la expresión (3.35) se tiene que:

$$\mathbf{H}|_{d \rightarrow 0} = \begin{bmatrix} \mathbf{0}_N & \mathbf{I}_N \\ \mathbf{I}_N & \mathbf{0}_N \end{bmatrix}. \quad (3.36)$$

Se ha denotado con  $\mathbf{I}_N$  la matriz identidad de orden  $N \times N$ . Naturalmente las variantes de matrices que se obtienen modificando el arreglo de vectores en (3.6) podrán relacionarse con la matriz  $\mathbf{T}$ . En la siguiente sección dichas relaciones son utilizadas para analizar la estabilidad numérica de dichas variantes.

## 3.2 Relaciones entre las distintas matrices y análisis de la estabilidad numérica

### 3.2.1 Relación entre las matrices M-T. Estabilidad numérica de M

Definamos la matriz:

$$\mathbf{R}(z) = \begin{vmatrix} \mathbf{I}_N & \mathbf{0}_N \\ \mathbf{P}(z) & \mathbf{B}(z) \end{vmatrix}. \quad (3.37)$$

Entonces teniendo en cuenta las definiciones (3.1) y (3.6) vemos que  $\mathbf{T}$  y  $\mathbf{M}$  se relacionan a través de  $\mathbf{R}$  mediante la expresión:

$$\mathbf{M}(z, z_0) = \mathbf{R}(z)^{-1} \cdot \mathbf{T}(z, z_0) \cdot \mathbf{R}(z_0). \quad (3.38)$$

Esta relación indica claramente que la matriz  $\mathbf{M}$  es vulnerable a las inestabilidades numéricas que se manifiestan en la matriz  $\mathbf{T}$ .

### 3.2.2 Relación entre las matrices K-T. Estabilidad numérica de K

Las matrices  $\mathbf{K}$  y  $\mathbf{T}$  se relacionan mediante la expresión (3.19). Queda claro entonces que si la matriz  $\mathbf{T}$  manifiesta una inestabilidad numérica en un problema dado, lo mismo ocurrirá con la matriz de transferencia de coeficientes  $\mathbf{K}$  independientemente de la base de soluciones LI seleccionada para construirla.

### 3.2.3 Relación entre las matrices H y T. Estabilidad numérica de H

Escribiendo explícitamente (3.6) y (3.33) en términos de los bloques matriciales de  $\mathbf{H}$  y  $\mathbf{T}$  se podrá obtener, mediante operaciones algebraicas simples la relación:

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} -[\mathbf{T}_{11}]^{-1} \cdot \mathbf{T}_{12} & [\mathbf{T}_{11}]^{-1} \\ \mathbf{T}_{22} - \mathbf{T}_{21} \cdot [\mathbf{T}_{11}]^{-1} \cdot \mathbf{T}_{12} & \mathbf{T}_{21} \cdot [\mathbf{T}_{11}]^{-1} \end{bmatrix}, \quad (3.39)$$

Como se indicó en la sección 3.1.2 la matrix  $\mathbf{T}$  para una ESLM dada es única independientemente de la base de soluciones LI seleccionada. Como consecuencia la matriz híbrida obtenida a partir de las relaciones (3.39) también será independiente de la base de soluciones LI seleccionada para construir  $\mathbf{T}$ . Por simplicidad se considerará que la matriz  $\mathbf{T}$  expresada en (3.9) fue construida con una base tal que  $\mathbf{\Pi}_{k_N}(d)$  contiene los eigenvalores con parte imaginaria positiva  $\Im(k_1, k_2, \dots, k_N) > 0$  y  $\mathbf{\Pi}_{k_{2N}}(d)$  contiene los eigenvalores con parte imaginaria negativa  $\Im(k_{N+1}, k_{N+2}, \dots, k_{2N}) < 0$ . De esta forma las submatrices  $\mathbf{\Pi}_{k_N}(d)$  y  $\mathbf{\Pi}_{k_{2N}}(-d)$  se reducen a la matriz nula ( $\mathbf{0}_N$ ) cuando el espesor  $d \rightarrow \infty$  mientras que los elementos de  $\mathbf{\Pi}_{k_N}(-d)$  y  $\mathbf{\Pi}_{k_{2N}}(d)$  tienden al infinito.

Sustituyendo en (3.39) las expresiones de las particiones  $\mathbf{T}_{11}$ ,  $\mathbf{T}_{12}$ ,  $\mathbf{T}_{21}$  y  $\mathbf{T}_{22}$  dadas en el apéndice H se tendrá:

$$\mathbf{H}_{11} = \left[ \mathbf{A}_{0(2N)} \cdot \mathbf{F}_{0(2N)}^{-1} - \gamma_{21} \cdot \mathbf{\Pi}_{k_N}(-d) \cdot \mathbf{F}_{0(N)}^{-1} \cdot \mathbf{F}_{0(2N)} \cdot \mathbf{\Pi}_{k_{2N}}(d) \cdot \gamma_{12}^{-1} \right]^{-1} + \left[ \mathbf{A}_{0(N)} \cdot \mathbf{F}_{0(N)}^{-1} - \gamma_{22} \cdot \mathbf{\Pi}_{k_{2N}}(-d) \cdot \mathbf{F}_{0(2N)}^{-1} \cdot \mathbf{F}_{0(N)} \cdot \mathbf{\Pi}_{k_N}(d) \cdot \gamma_{11}^{-1} \right]^{-1}; \quad (3.40)$$

$$\mathbf{H}_{12} = \gamma_{12} \cdot \mathbf{\Pi}_{k_{2N}}(-d) \cdot \mathbf{F}_{0(2N)}^{-1} \cdot \left[ \mathbf{I}_N - \mathbf{F}_{0(N)} \cdot \mathbf{\Pi}_{k_N}(d) \cdot \mathbf{A}_{0(N)}^{-1} \cdot \mathbf{A}_{0(2N)} \cdot \mathbf{\Pi}_{k_{2N}}(-d) \cdot \mathbf{F}_{0(2N)}^{-1} \right]^{-1}; \quad (3.41)$$

$$\mathbf{H}_{21} = [\mathbf{A}_{0(N)} - \mathbf{H}_{22} \cdot \mathbf{F}_{0(N)}] \cdot \mathbf{\Pi}_{k_N}(d) \cdot \gamma_{21}^{-1} + [\mathbf{A}_{0(2N)} - \mathbf{H}_{22} \cdot \mathbf{F}_{0(2N)}] \cdot \mathbf{\Pi}_{k_{2N}}(d) \cdot \gamma_{22}^{-1}; \quad (3.42)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{22} = & \left[ \mathbf{F}_{0(N)} \cdot \mathbf{A}_{0(N)}^{-1} - \mathbf{F}_{0(2N)} \cdot \mathbf{\Pi}_{k_{2N}}(d) \cdot \mathbf{A}_{0(2N)}^{-1} \cdot \mathbf{A}_{0(N)} \cdot \mathbf{\Pi}_{k_N}(-d) \cdot \mathbf{A}_{0(N)}^{-1} \right]^{-1} + \\ & \left[ \mathbf{F}_{0(2N)} \cdot \mathbf{A}_{0(2N)}^{-1} - \mathbf{F}_{0(N)} \cdot \mathbf{\Pi}_{k_N}(d) \cdot \mathbf{A}_{0(N)}^{-1} \cdot \mathbf{A}_{0(2N)} \cdot \mathbf{\Pi}_{k_{2N}}(-d) \cdot \mathbf{A}_{0(2N)}^{-1} \right]^{-1}. \end{aligned} \quad (3.43)$$

Los coeficientes  $\gamma_{11}$ ,  $\gamma_{12}$ ,  $\gamma_{21}$  y  $\gamma_{22}$  se expresaron en términos de  $\mathbf{F}_{0(N)}$ ,  $\mathbf{F}_{0(2N)}$ ,  $\mathbf{A}_{0(N)}$  y  $\mathbf{A}_{0(2N)}$  como se indica en el apéndice H.

Cuando  $d$  crece indefinidamente las expresiones (3.40-3.43) se reducen a:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{11}|_{d \rightarrow \infty} &= \mathbf{F}_{0(N)} \cdot \mathbf{A}_{0(N)}^{-1} \cdot [\mathbf{I}_N - \mathbf{0}_N]^{-1} = \mathbf{F}_{0(N)} \cdot \mathbf{A}_{0(N)}^{-1} \\ \mathbf{H}_{12}|_{d \rightarrow \infty} &= \mathbf{0}_N \cdot [\mathbf{I}_N - \mathbf{0}_N]^{-1} = \mathbf{0}_N \\ \mathbf{H}_{21}|_{d \rightarrow \infty} &= \left[ \mathbf{A}_{0(2N)} - \mathbf{A}_{0(2N)} \cdot \mathbf{F}_{0(2N)}^{-1} \cdot [\mathbf{I}_N - \mathbf{0}_N]^{-1} \cdot \mathbf{F}_{0(N)} \right] \cdot \mathbf{0}_N \\ &\quad + \left[ \mathbf{A}_{0(2N)} - \mathbf{A}_{0(2N)} [\mathbf{I}_N - \mathbf{0}_N]^{-1} \right] \cdot \mathbf{\Pi}_{k_{2N}}(d)|_{d \rightarrow \infty} \cdot \gamma_{22}^{-1} = \mathbf{0}_N \\ \mathbf{H}_{22}|_{d \rightarrow \infty} &= \mathbf{A}_{0(2N)} \cdot \mathbf{F}_{0(2N)}^{-1} \cdot [\mathbf{I}_N - \mathbf{0}_N]^{-1} = \mathbf{A}_{0(2N)} \cdot \mathbf{F}_{0(2N)}^{-1}. \end{aligned} \quad (3.44)$$

Hemos denotado con  $[\mathbf{I}_N - \mathbf{0}_N]$  la matriz identidad de orden  $N \times N$  obtenida mediante redondeo y cuyos elementos están caracterizados por un error de redondeo con valor absoluto  $Er \leq u$  (*unidad de redondeo*). Por tanto, de acuerdo con las expresiones (3.44) los elementos de la matriz  $\mathbf{H}$  se caracterizan por un error cuyo absoluto no depende de  $d$  y no se acumula. Estos resultados muestran que cuando  $d$  crece indefinidamente la matriz  $\mathbf{H}$  converge a valores finitos sin pérdida significativa de precisión.

Por otra parte cuando  $d \rightarrow 0$  se sabe que  $\mathbf{T} \equiv \mathbf{I}_{2N}$  (no hay degradación numérica) y la sustitución de sus particiones de orden  $N \times N$  en (3.39) resulta en la expresión (3.36). Por tanto cuando  $d \rightarrow 0$  la matriz híbrida también converge a valores finitos de forma numéricamente estable.

### 3.2.4 Relación entre las matrices $\mathbf{E}$ y $\mathbf{T}$ . Estabilidad numérica de $\mathbf{E}$

Escribiendo explícitamente (3.6) y (3.29) e identificando los términos apropiados se podrá obtener, mediante operaciones algebraicas simples la relación:

$$\mathbf{E} = \begin{bmatrix} -[\mathbf{T}_{12}]^{-1} \cdot \mathbf{T}_{11} & [\mathbf{T}_{12}]^{-1} \\ \mathbf{T}_{21} - \mathbf{T}_{22} \cdot [\mathbf{T}_{12}]^{-1} \cdot \mathbf{T}_{11} & \mathbf{T}_{22} \cdot [\mathbf{T}_{12}]^{-1} \end{bmatrix}. \quad (3.45)$$

Dada su relación con  $\mathbf{T}$  la matriz de rigidez, al igual que  $\mathbf{H}$ , también será independiente de la base de soluciones LI seleccionada para construir  $\mathbf{T}$ . Por tanto también se considerará que la matriz (3.9) fue construida con una base tal que  $\mathbf{\Pi}_{k_N}(d)$  contiene los eigenvalores con parte imaginaria positiva  $\Im(k_1, k_2, \dots, k_N) > 0$  y  $\mathbf{\Pi}_{k_{2N}}(d)$  contiene los eigenvalores con parte imaginaria negativa  $\Im(k_{N+1}, k_{N+2}, \dots, k_{2N}) < 0$ .

Se repite el procedimiento aplicado a  $\mathbf{H}$  y se sustituye en (3.45) la expresión de las particiones  $\mathbf{T}_{11}$ ,  $\mathbf{T}_{12}$ ,  $\mathbf{T}_{21}$  y  $\mathbf{T}_{22}$  para luego calcular el límite cuando  $d \rightarrow \infty$ . El resultado es:

$$\begin{aligned}
\mathbf{E}_{11}|_{d \rightarrow \infty} &= \mathbf{A}_{0(N)} \cdot \mathbf{F}_{0(N)}^{-1} \cdot [\mathbf{I}_N - \mathbf{0}_N]^{-1} = \mathbf{A}_{0(N)} \cdot \mathbf{F}_{0(N)}^{-1} \\
\mathbf{E}_{12}|_{d \rightarrow \infty} &= \mathbf{0}_N \cdot [\mathbf{I}_N - \mathbf{0}_N]^{-1} = \mathbf{0}_N \\
\mathbf{E}_{21}|_{d \rightarrow \infty} &= \left[ \mathbf{A}_{0(N)} - \mathbf{A}_{0(2N)} \cdot \mathbf{F}_{0(2N)}^{-1} \cdot [\mathbf{I}_N - \mathbf{0}_N]^{-1} \cdot \mathbf{F}_{0(N)} \right] \cdot \mathbf{0}_N \\
&\quad + \left[ \mathbf{A}_{0(2N)} - \mathbf{A}_{0(2N)} [\mathbf{I}_N - \mathbf{0}_N]^{-1} \right] \cdot \mathbf{\Pi}_{k_{2N}}(d)|_{d \rightarrow \infty} \cdot \gamma_{12}^{-1} = \mathbf{0}_N \\
\mathbf{E}_{22}|_{d \rightarrow \infty} &= \mathbf{A}_{0(2N)} \cdot \mathbf{F}_{0(2N)}^{-1} \cdot [\mathbf{I}_N - \mathbf{0}_N]^{-1} = \mathbf{A}_{0(2N)} \cdot \mathbf{F}_{0(2N)}^{-1} \cdot
\end{aligned} \tag{3.46}$$

Estos resultados muestran que cuando  $d$  crece indefinidamente, la matriz  $\mathbf{E}$  también converge a valores finitos sin pérdida significativa de precisión. Por otra parte, cuando  $d \rightarrow 0$  sabemos que  $\mathbf{T} \equiv \mathbf{I}_{2N}$  (no hay degradación numérica) pero debido a que  $\mathbf{T}_{12} = \mathbf{T}_{21} = \mathbf{0}_N$  las relaciones (3.45) indican que  $\mathbf{E}$  no es numéricamente computable conduciendo a una singularidad numérica, resultado que se obtuvo del análisis de la expresión (3.31). Esta singularidad sugiere que antes tiene lugar el problema  $\Omega - d$ . Asumamos que  $d$  es muy pequeño pero no lo suficiente para provocar la mencionada singularidad. Partiendo de (3.45) podemos expresar la partición  $\mathbf{E}_{21}$  en la forma:

$$\mathbf{E}_{21} = -(\mathbf{I}_N - \mathbf{T}_{21} \cdot \mathbf{T}_{11}^{-1} \cdot \mathbf{T}_{12} \cdot \mathbf{T}_{22}^{-1}) \cdot \mathbf{T}_{22} \cdot \mathbf{T}_{12}^{-1} \cdot \mathbf{T}_{11}, \tag{3.47}$$

entonces para  $d$  suficientemente pequeño la expresión entre paréntesis será objeto de redondeo resultando:

$$\mathbf{E}_{21}|_{d \rightarrow 0} = -[\mathbf{I}_N - \mathbf{0}_N] \cdot \mathbf{T}_{12}^{-1}. \tag{3.48}$$

A diferencia de los límites indicados en (3.46) ahora el término  $[\mathbf{I}_N - \mathbf{0}_N]$  sujeto a redondeo multiplica al término  $\mathbf{T}_{12}^{-1}$  cuyo valor puede ser suficientemente grande como para que el error de redondeo afecte la matriz de rigidez dando lugar al problema  $\Omega - d$ .

### 3.2.5 Relación entre las matrices $\mathbf{S}$ y $\mathbf{H}$ . Estabilidad numérica de $\mathbf{S}$

Consideremos la representación de un sistema a capas mostrada en la figura 1.2. El dominio intermedio  $M$  puede consistir en una simple capa o puede ser un compuesto. Supongamos conocida la matriz híbrida  $\mathbf{H}(z_R, z_L)$  para  $M$  tal que:

$$\begin{vmatrix} \mathbf{F}(\mathbf{L} : z_L) \\ \mathbf{A}(\mathbf{R} : z_R) \end{vmatrix} = \mathbf{H}(z_R, z_L) \cdot \begin{vmatrix} \mathbf{A}(\mathbf{L} : z_L) \\ \mathbf{F}(\mathbf{R} : z_R) \end{vmatrix}. \tag{3.49}$$

La expresión que relaciona la matriz de dispersión  $\mathbf{S}(\mathbf{R}; \mathbf{L})$  con  $\mathbf{H}(z_R, z_L)$  viene dada por (apéndice J):

$$\begin{aligned}
\mathbf{S}(\mathbf{R}; \mathbf{L}) &= \left[ \begin{pmatrix} \mathbf{Q}_{12}(\mathbf{L} : z_L) & \mathbf{0}_N \\ \mathbf{0}_N & \mathbf{Q}_{21}(\mathbf{R} : z_R) \end{pmatrix} - \mathbf{H}(z_R, z_L) \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{Q}_{22}(\mathbf{L} : z_L) & \mathbf{0}_N \\ \mathbf{0}_N & \mathbf{Q}_{11}(\mathbf{R} : z_R) \end{pmatrix} \right]^{-1} \\
&\quad \cdot \left[ \mathbf{H}(z_R, z_L) \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{Q}_{21}(\mathbf{L} : z_L) & \mathbf{0}_N \\ \mathbf{0}_N & \mathbf{Q}_{12}(\mathbf{R} : z_R) \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \mathbf{Q}_{11}(\mathbf{L} : z_L) & \mathbf{0}_N \\ \mathbf{0}_N & \mathbf{Q}_{22}(\mathbf{R} : z_R) \end{pmatrix} \right]; \tag{3.50}
\end{aligned}$$

$$\begin{vmatrix} \mathbf{a}^-(\mathbf{L}) \\ \mathbf{a}^+(\mathbf{R}) \end{vmatrix} = \mathbf{S}(\mathbf{R}; \mathbf{L}) \cdot \begin{vmatrix} \mathbf{a}^+(\mathbf{L}) \\ \mathbf{a}^-(\mathbf{R}) \end{vmatrix}. \tag{3.51}$$

La matriz auxiliar  $\mathbf{Q}$  para un dominio  $\alpha$  ya fue definida antes en la expresión (3.8) y para este caso en particular su construcción se detalla en el apéndice J. Queda claro que la matriz de dispersión dada por

(3.50) también convergerá de forma numéricamente estable con independencia de que los espesores en la región M tiendan a cero o al infinito dado que la matriz  $\mathbf{H}$  es numéricamente estable en ambos casos.

En la práctica cuando se utiliza la matriz  $\mathbf{S}(\mathbf{R}; \mathbf{L})$  para relacionar los coeficientes del dominio externo R con los coeficientes del dominio externo L lo común es utilizar una base de soluciones LI reducida en las coordenadas  $z_L/z_R$ :

$$\begin{aligned}\mathbf{F}_\ell(\mathbf{L} : z) &= \mathbf{F}_{0\ell}(\mathbf{L}) \exp[ik_\ell(\mathbf{L})(z - z_L)]; \\ \mathbf{F}_\ell(\mathbf{R} : z) &= \mathbf{F}_{0\ell}(\mathbf{R}) \exp[ik_\ell(\mathbf{R})(z - z_R)].\end{aligned}\quad (3.52)$$

Sin embargo se puede comprobar analíticamente que la matriz de dispersión dada por (3.50) también converge de forma numéricamente estable si en lugar de la base (3.52) reducida en la coordenada  $z_L/z_R$  utilizamos una base reducida en una coordenada arbitraria diferente  $z_0/z_f$  del dominio correspondiente, ver figura 3.1. Utilizando la nueva base, las matrices  $\mathbf{Q}(\mathbf{L} : z_L)$  y  $\mathbf{Q}(\mathbf{R} : z_R)$  resultan:

$$\mathbf{Q}(\mathbf{L} : z_L) = \begin{vmatrix} \mathbf{F}_{0(N)}(\mathbf{L}) & \mathbf{F}_{0(2N)}(\mathbf{L}) \\ \mathbf{A}_{0(N)}(\mathbf{L}) & \mathbf{A}_{0(2N)}(\mathbf{L}) \end{vmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{\Pi}_{k_N}(d_L) & \mathbf{0}_N \\ \mathbf{0}_N & \mathbf{\Pi}_{k_{2N}}(d_L) \end{bmatrix}, \quad (3.53)$$

y

$$\mathbf{Q}(\mathbf{R} : z_R) = \begin{vmatrix} \mathbf{F}_{0(N)}(\mathbf{R}) & \mathbf{F}_{0(2N)}(\mathbf{R}) \\ \mathbf{A}_{0(N)}(\mathbf{R}) & \mathbf{A}_{0(2N)}(\mathbf{R}) \end{vmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{\Pi}_{k_N}(-d_R) & \mathbf{0}_N \\ \mathbf{0}_N & \mathbf{\Pi}_{k_{2N}}(-d_R) \end{bmatrix}, \quad (3.54)$$

donde  $d_L = z_L - z_0 > 0$  y  $d_R = z_f - z_R > 0$ .

De acuerdo con el diseño de la matriz auxiliar  $\mathbf{Q}$  (apéndice J) la submatriz  $\mathbf{\Pi}_{k_N}(d)$ ,  $d = d_L, d_R$ , contiene los eigenvalores con parte imaginaria positiva  $\Im(k_1, k_2, \dots, k_N) > 0$  y  $\mathbf{\Pi}_{k_{2N}}(d)$  contiene los eigenvalores con parte imaginaria negativa  $\Im(k_{N+1}, k_{N+2}, \dots, k_{2N}) < 0$ . Ahora la matriz de dispersión dada por (3.50) dependerá de los espesores  $d_L$  y  $d_R$ . Sustituyendo (3.53) y (3.54) en (3.50), después de un poco de álgebra sencilla se obtiene que:

$$\mathbf{S}(\mathbf{R}; \mathbf{L}) = \begin{vmatrix} \mathbf{\Pi}_{k_{2N}}(-d_L) & \mathbf{0}_N \\ \mathbf{0}_N & \mathbf{\Pi}_{k_N}(d_R) \end{vmatrix} \cdot \mathbf{S}_0 \cdot \begin{vmatrix} \mathbf{\Pi}_{k_N}(d_L) & \mathbf{0}_N \\ \mathbf{0}_N & \mathbf{\Pi}_{k_{2N}}(-d_R) \end{vmatrix}, \quad (3.55)$$

donde:

$$\begin{aligned}\mathbf{S}_0 = & \left[ \begin{pmatrix} \mathbf{F}_{0(2N)}(\mathbf{L}) & \mathbf{0}_N \\ \mathbf{0}_N & \mathbf{A}_{0(N)}(\mathbf{R}) \end{pmatrix} - \mathbf{H}(z_R, z_L) \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{0(2N)}(\mathbf{L}) & \mathbf{0}_N \\ \mathbf{0}_N & \mathbf{F}_{0(N)}(\mathbf{R}) \end{pmatrix} \right]^{-1} \\ & \cdot \left[ \mathbf{H}(z_R, z_L) \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{0(N)}(\mathbf{L}) & \mathbf{0}_N \\ \mathbf{0}_N & \mathbf{F}_{0(2N)}(\mathbf{R}) \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \mathbf{F}_{0(N)}(\mathbf{L}) & \mathbf{0}_N \\ \mathbf{0}_N & \mathbf{A}_{0(2N)}(\mathbf{R}) \end{pmatrix} \right];\end{aligned}\quad (3.56)$$

La matriz  $\mathbf{S}_0$  realmente es la matriz que se obtiene de (3.50) al sustituir la base (3.52) y ya sabemos que es numéricamente estable. Analicemos la matriz (3.55). Como ya se sabe de las relaciones entre matrices estudiadas anteriormente, las submatrices  $\mathbf{\Pi}_{k_N}(d)$  y  $\mathbf{\Pi}_{k_{2N}}(-d)$  se reducirán a la matriz nula ( $\mathbf{0}_N$ ) cuando el espesor  $d \rightarrow \infty$ . Esto significa que en los elementos de la matriz de dispersión dada por (3.55) solo aparecerán exponenciales que decrecen con el incremento de los espesores  $d_L$  y  $d_R$  y en consecuencia la estabilidad numérica de la matriz  $\mathbf{S}(\mathbf{R}; \mathbf{L})$  no se afectará por dichos valores. Este resultado indica que para los dominios externos L y R se podrán utilizar bases reducidas en coordenadas diferentes de  $z_L$  y  $z_R$ , sin temor a afectar la estabilidad numérica de la matriz de dispersión dada por (3.50).

### 3.2.6 Estabilidad numérica de las matrices inversas: $\mathbf{T}^{-1}$ , $\mathbf{Lc}$ , $\mathbf{H}^{-1}$

Utilizando las expresiones desarrolladas para las matrices  $\mathbf{T}$ ,  $\mathbf{E}$  y  $\mathbf{H}$  es posible de forma directa analizar la estabilidad numérica de sus correspondientes matrices inversas.

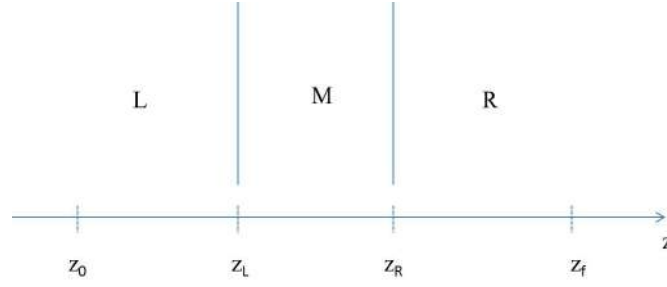


Figura 3.1: Descripción simplificada de una heteroestructura. Configuración L – M – R donde el dominio intermedio M puede ser una simple capa o un compuesto. Se indican las coordenadas  $z_L$  y  $z_R$  de las intercaras que empalman a M con los dominios externos L y R así como la coordenada arbitraria  $z_0/z_f$  en el dominio externo L/R.

Al invertir la expresión (3.9) vemos que  $\mathbf{T}^{-1} = \mathbf{T}(-d)$  por tanto la inversa de  $\mathbf{T}$  tendrá el mismo comportamiento numérico que  $\mathbf{T}$ . Al invertir las expresiones (3.31) y (3.35) correspondientes a  $\mathbf{E}$  y  $\mathbf{H}$  respectivamente, el resultado es la permutación de la submatriz  $\mathbf{F}_{0(N)}$  por la submatriz  $\mathbf{A}_{0(N)}$  y de  $\mathbf{F}_{0(2N)}$  por  $\mathbf{A}_{0(2N)}$ . Por tanto las matrices  $\mathbf{H}^{-1}$  y  $\mathbf{Lc} = \mathbf{E}^{-1}$  también tendrán un comportamiento numérico similar al de sus contrapartes  $\mathbf{H}$  y  $\mathbf{E}$ .

### 3.3 Reglas de composición de matrices

#### 3.3.1 Regla de composición de la matriz $\mathbf{H}$

Consideremos dos dominios empalmados que denotaremos I, D y sea  $z_{int}$  la coordenada de la intercara común. El dominio de la izquierda, I, estará delimitado entre las coordenadas  $z_0$  y  $z_{int}$  y puede estar compuesto de una o varias capas. El dominio D, ubicado a la derecha de I estará delimitado por las coordenadas  $z_{int}$  y  $z_R$ . Denotaremos con  $\mathbf{H}(D) \equiv \mathbf{H}(z_R, z_{int})$  a la matriz híbrida de dicho dominio y con  $\mathbf{H}(I) \equiv \mathbf{H}(z_{int}, z_0)$  a la matriz híbrida de I.

Queremos obtener una expresión para la matriz híbrida  $\mathbf{H}(z_R, z_0)$  del sistema empalmado I|D delimitado por las coordenadas  $z_0$  y  $z_R$ .

Utilizando la definición (3.33) podemos plantear:

$$\begin{vmatrix} \mathbf{F}(z_0) \\ \mathbf{A}(z_{int}) \end{vmatrix} = \mathbf{H}(I) \cdot \begin{vmatrix} \mathbf{A}(z_0) \\ \mathbf{F}(z_{int}) \end{vmatrix}; \quad (3.57)$$

$$\begin{vmatrix} \mathbf{F}(z_{int}) \\ \mathbf{A}(z_R) \end{vmatrix} = \mathbf{H}(D) \cdot \begin{vmatrix} \mathbf{A}(z_{int}) \\ \mathbf{F}(z_R) \end{vmatrix}; \quad (3.58)$$

$$\begin{vmatrix} \mathbf{F}(z_0) \\ \mathbf{A}(z_R) \end{vmatrix} = \mathbf{H}(z_R, z_0) \cdot \begin{vmatrix} \mathbf{A}(z_0) \\ \mathbf{F}(z_R) \end{vmatrix}. \quad (3.59)$$

El objetivo es expresar las cuatro particiones de orden  $N \times N$  de  $\mathbf{H}(z_R, z_0)$  en términos de las particiones de igual orden en  $\mathbf{H}(D)$  y  $\mathbf{H}(I)$ . Para ello se escriben explícitamente las expresiones anteriores y se considera la continuidad de  $\mathbf{F}$  y  $\mathbf{A}$  en la coordenada  $z_{int}$  de la intercara. Después de un poco de álgebra se obtiene que:



$$\begin{aligned}
\mathbf{H}_{11}(z_R, z_0) &= \mathbf{H}_{11}(\mathbf{I}) + \mathbf{H}_{12}(\mathbf{I}) \cdot \mathbf{H}_{11}(\mathbf{D}) \cdot [\mathbf{I}_N - \mathbf{H}_{22}(\mathbf{I}) \cdot \mathbf{H}_{11}(\mathbf{D})]^{-1} \cdot \mathbf{H}_{21}(\mathbf{I}); \\
\mathbf{H}_{12}(z_R, z_0) &= \mathbf{H}_{12}(\mathbf{I}) \cdot \left[ \mathbf{I}_N + \mathbf{H}_{11}(\mathbf{D}) \cdot [\mathbf{I}_N - \mathbf{H}_{22}(\mathbf{I}) \cdot \mathbf{H}_{11}(\mathbf{D})]^{-1} \cdot \mathbf{H}_{22}(\mathbf{I}) \right] \cdot \mathbf{H}_{12}(\mathbf{D}); \\
\mathbf{H}_{21}(z_R, z_0) &= \mathbf{H}_{21}(\mathbf{D}) \cdot [\mathbf{I} - \mathbf{H}_{22}(\mathbf{I}) \cdot \mathbf{H}_{11}(\mathbf{D})]^{-1} \cdot \mathbf{H}_{21}(\mathbf{I}); \\
\mathbf{H}_{22}(z_R, z_0) &= \mathbf{H}_{22}(\mathbf{D}) + \mathbf{H}_{21}(\mathbf{D}) \cdot [\mathbf{I}_N - \mathbf{H}_{22}(\mathbf{I}) \cdot \mathbf{H}_{11}(\mathbf{D})]^{-1} \cdot \mathbf{H}_{22}(\mathbf{I}) \cdot \mathbf{H}_{12}(\mathbf{D}).
\end{aligned} \tag{3.60}$$

Esta regla de composición fue planteada en [16] bajo el nombre de algoritmo recursivo de la matriz  $\mathbf{H}$  para abordar el problema de la propagación de ondas elásticas en medios anisotrópicos multicapas.

Utilicemos el símbolo  $\otimes$  y la regla de composición dada en (3.60) para definir un producto entre matrices. Diremos que  $\mathbf{H}(z_R, z_0)$  es el resultado de dicho producto entre la matriz  $\mathbf{H}(\mathbf{D})$  y  $\mathbf{H}(\mathbf{I})$  y lo expresaremos en la forma:

$$\mathbf{H}(z_R, z_0) = \mathbf{H}(\mathbf{D}) \otimes \mathbf{H}(\mathbf{I}). \tag{3.61}$$

### 3.3.2 Regla de composición de la matriz $\mathbf{E}$

Procediendo de igual forma que con la matriz  $\mathbf{H}$  (sección 3.3.1) tendremos que la matriz de rigidez  $\mathbf{E}(z_R, z_0)$  que relaciona el campo  $\mathbf{F}$  y la forma diferencial lineal  $\mathbf{A}$  entre las coordenadas  $z_0$  y  $z_R$  que delimitan el sistema empalmado I|D viene dada por la regla de composición:

$$\begin{aligned}
\mathbf{E}_{11}(z_R, z_0) &= \mathbf{E}_{11}(\mathbf{I}) + \mathbf{E}_{12}(\mathbf{I}) \cdot [\mathbf{E}_{11}(\mathbf{D}) - \mathbf{E}_{22}(\mathbf{I})]^{-1} \cdot \mathbf{E}_{21}(\mathbf{I}); \\
\mathbf{E}_{12}(z_R, z_0) &= -\mathbf{E}_{12}(\mathbf{I}) \cdot [\mathbf{E}_{11}(\mathbf{D}) - \mathbf{E}_{22}(\mathbf{I})]^{-1} \cdot \mathbf{E}_{12}(\mathbf{D}); \\
\mathbf{E}_{21}(z_R, z_0) &= \mathbf{E}_{21}(\mathbf{D}) \cdot [\mathbf{E}_{11}(\mathbf{D}) - \mathbf{E}_{22}(\mathbf{I})]^{-1} \cdot \mathbf{E}_{21}(\mathbf{I}); \\
\mathbf{E}_{22}(z_R, z_0) &= \mathbf{E}_{22}(\mathbf{D}) - \mathbf{E}_{21}(\mathbf{D}) \cdot [\mathbf{E}_{11}(\mathbf{D}) - \mathbf{E}_{22}(\mathbf{I})]^{-1} \cdot \mathbf{E}_{12}(\mathbf{D}).
\end{aligned} \tag{3.62}$$

Hemos denotado con  $\mathbf{E}(\mathbf{I}) \equiv \mathbf{E}(z_{int}, z_0)$  a la matriz de rigidez del dominio I el cual puede estar compuesto de una o varias capas y con  $\mathbf{E}(\mathbf{D}) \equiv \mathbf{E}(z_R, z_{int})$  la matriz de rigidez del dominio D.

De igual forma que con  $\mathbf{H}$  la regla de composición (3.62) puede representarse mediante un producto que representaremos con el símbolo  $\boxtimes$ . Es decir:

$$\mathbf{E}(z_R, z_0) = \mathbf{E}(\mathbf{D}) \boxtimes \mathbf{E}(\mathbf{I}). \tag{3.63}$$

Esta regla de composición o algoritmo recursivo de la matriz  $\mathbf{E}$  ha sido aplicada en varios estudios de la propagación de ondas elásticas en medios anisotrópicos multicapas [16, 28, 29].

### 3.3.3 Regla de composición de la matriz $\mathbf{S}$

La regla de composición para la matriz de dispersión puede obtenerse siguiendo el procedimiento detallado en [8]. Aquí solo se mencionarán las ideas esenciales de dicho procedimiento y la regla de composición que resulta de este.

Considérese la configuración L – M – R dada en la figura 1.2 donde M puede estar compuesto por una o varias capas dado que su estructura interna es irrelevante para el presente análisis. Se quiere obtener una regla de composición para  $S(\mathbf{R}; \mathbf{L})$  en términos de  $S(\mathbf{M}; \mathbf{L})$  y  $S(\mathbf{R}; \mathbf{M})$ , cada una definida de acuerdo con (3.26) para las intercaras L|M y M|R respectivamente:

$$\begin{vmatrix} \mathbf{a}^-(\mathbf{L}) \\ \mathbf{a}^+(\mathbf{M}) \end{vmatrix} = \mathbf{S}(\mathbf{M}; \mathbf{L}) \cdot \begin{vmatrix} \mathbf{a}^+(\mathbf{L}) \\ \mathbf{a}^-(\mathbf{M}) \end{vmatrix}; \tag{3.64}$$

$$\begin{vmatrix} \mathbf{a}^-(M) \\ \mathbf{a}^+(R) \end{vmatrix} = \mathbf{S}(R; M) \cdot \begin{vmatrix} \mathbf{a}^+(M) \\ \mathbf{a}^-(R) \end{vmatrix}; \quad (3.65)$$

$$\begin{vmatrix} \mathbf{a}^-(L) \\ \mathbf{a}^+(R) \end{vmatrix} = \mathbf{S}(R; L) \cdot \begin{vmatrix} \mathbf{a}^+(L) \\ \mathbf{a}^-(R) \end{vmatrix}. \quad (3.66)$$

Escribiendo explícitamente las expresiones anteriores, después de un poco de álgebra para expresar las cuatro particiones de orden  $N \times N$  de  $\mathbf{S}(R; L)$  en términos de las particiones de igual orden de  $\mathbf{S}(R; M)$  y  $\mathbf{S}(M; L)$  se obtuvo que:

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_{11}(R; L) &= \mathbf{S}_{11}(M; L) + \mathbf{S}_{12}(M; L) \cdot \mathbf{S}_{11}(R; M) \cdot [\mathbf{I}_N - \mathbf{S}_{22}(M; L) \cdot \mathbf{S}_{11}(R; M)]^{-1} \cdot \mathbf{S}_{21}(M; L); \\ \mathbf{S}_{12}(R; L) &= \mathbf{S}_{12}(M; L) \cdot \mathbf{S}_{12}(R; M) + \mathbf{S}_{12}(M; L) \cdot \mathbf{S}_{11}(R; M) \cdot [\mathbf{I}_N - \mathbf{S}_{22}(M; L) \cdot \mathbf{S}_{11}(R; M)]^{-1} \\ &\quad \cdot \mathbf{S}_{22}(M; L) \cdot \mathbf{S}_{12}(R; M); \\ \mathbf{S}_{21}(R; L) &= \mathbf{S}_{21}(R; M) \cdot [\mathbf{I}_N - \mathbf{S}_{22}(M; L) \cdot \mathbf{S}_{11}(R; M)]^{-1} \cdot \mathbf{S}_{21}(M; L); \\ \mathbf{S}_{22}(R; L) &= \mathbf{S}_{22}(R; M) + \mathbf{S}_{21}(R; M) \cdot [\mathbf{I}_N - \mathbf{S}_{22}(M; L) \cdot \mathbf{S}_{11}(R; M)]^{-1} \cdot \mathbf{S}_{22}(M; L) \cdot \mathbf{S}_{12}(R; M). \end{aligned} \quad (3.67)$$

Utilicemos el símbolo  $\otimes$  y la regla de composición dada en (3.67) para definir un nuevo producto entre matrices. Diremos que  $\mathbf{S}(R; M)$  es el resultado de dicho producto entre la matriz  $\mathbf{S}(M; L)$  y  $\mathbf{S}(R; M)$  y lo expresaremos en la forma:

$$\mathbf{S}(R; M) = \mathbf{S}(R; M) \otimes \mathbf{S}(M; L). \quad (3.68)$$

### 3.3.4 Regla de composición de las M, T y K

Las reglas de composición para las matrices  $\mathbf{M}$ ,  $\mathbf{T}$  y  $\mathbf{K}$  vienen dadas en (3.5), (3.13) y (3.25) respectivamente.

## Capítulo 4

# Formulación general de problemas de contorno típicos en términos de matrices numéricamente estables

Como ya se conoce las matrices de transferencia proporcionan la solución de un sistema diferencial, dados los valores iniciales. Si adicionalmente se imponen condiciones de contorno se habrá definido un problema físico el cual podrá ser resuelto completamente en términos de una matriz de transferencia. La formulación de varios problemas de contorno típicos en términos de la matriz de transferencia asociada  $\mathbf{T}$  puede encontrarse en capítulo 6 de [8]. Entre ellos podrán encontrarse problemas en superredes así como pozos cuánticos con barreras finitas o infinitas.

En este capítulo abordaremos la formulación de algunos de estos problemas de contorno típicos pero en términos de matrices numéricamente estables capaces de evadir el problema  $\Omega - d$  como son, la matriz híbrida ( $\mathbf{H}$ ), la matriz de Stiffness  $\mathbf{E}$  y la matriz de dispersión ( $\mathbf{S}$ ). Aunque la lista de problemas de contornos que podemos abordar en términos de  $\mathbf{H}$ ,  $\mathbf{E}$  y  $\mathbf{S}$  es más extensa, nos centraremos en aquellos cuya formulación es aplicable en la solución de los problemas abordados en el capítulo 5. De forma adicional solo se abordará el problema de los sistemas periódicos para cualquier valor de  $N$ , y por su interés práctico y académico analizaremos el problema del movimiento de electrones en un campo de potencial periódico unidimensional (modelo de Kronig-Penney) para el que escribiremos explícitamente relaciones de dispersión y las compararemos con relaciones propuestas en la literatura como solución numéricamente estable para dicho modelo.

### 4.1 Sistemas de pozos y barreras

#### 4.1.1 Sistema de barreras finitas

##### Planteamiento del problema en términos de la matriz de dispersión

Considérese la configuración L–M–R de un sistema a capas. En este caso el dominio  $\mathbf{M}$  puede involucrar una o varias barreras y el énfasis recae en el cálculo de la reflectancias y la transmitancias. Se asume que tenemos condiciones de empalme *-full matching* (FM) en las intercaras L|M y M|R, es decir continuidad del campo  $\mathbf{F}$  y de la forma lineal asociada  $\mathbf{A}$  en ambas intercaras. Planteemos el problema en términos de la matriz de dispersión:

$$\begin{vmatrix} \mathbf{a}^-(L) \\ \mathbf{a}^+(R) \end{vmatrix} = \mathbf{S}(R;L) \cdot \begin{vmatrix} \mathbf{a}^+(L) \\ \mathbf{a}^-(R) \end{vmatrix}, \quad (4.1)$$

Si asumimos que  $\mathbf{a}^-(R) = \mathbf{0}$  entonces describimos un experimento en el cual la onda incidente por la izquierda  $\mathbf{a}^+(L)$  se refleja  $-\mathbf{a}^-(L)$  y se transmite  $-\mathbf{a}^+(R)$  parcialmente. Estos vectores de coeficientes se relacionan mediante la matriz de reflexión/transmisión,  $\mathbf{r} / \mathbf{t}$ , de amplitud en la forma:  $\mathbf{a}^-(L) = \mathbf{r} \cdot \mathbf{a}^+(L)$  y  $\mathbf{a}^+(R) = \mathbf{t} \cdot \mathbf{a}^+(L)$ .

Haciendo  $\mathbf{a}^-(R) = \mathbf{0}$  en (4.1) tenemos que:

$$\mathbf{r} = \mathbf{S}_{11}(R;L), \quad (4.2)$$

$$\mathbf{t} = \mathbf{S}_{21}(R;L). \quad (4.3)$$

Para incidencia por la derecha,  $\mathbf{a}^+(L) = \mathbf{0}$ , la matriz de reflexión/transmisión de amplitud,  $\mathbf{r}' / \mathbf{t}'$ , toma el valor:

$$\mathbf{r}' = \mathbf{S}_{22}(R;L), \quad (4.4)$$

$$\mathbf{t}' = \mathbf{S}_{12}(R;L). \quad (4.5)$$

Supongamos, por ejemplo, incidencia por la izquierda. Entonces una vez calculada  $\mathbf{S}(R;L)$  las ecuaciones  $\mathbf{a}^-(L) = \mathbf{S}_{11}(R;L) \cdot \mathbf{a}^+(L)$  y  $\mathbf{a}^+(R) = \mathbf{S}_{21}(R;L) \cdot \mathbf{a}^+(L)$  permitirán determinar los coeficientes de reflexión y de transmisión que interesan en el problema que se estudia. Estos coeficientes los expresaremos como cocientes entre componentes de  $\mathbf{a}^-(L)$  y  $\mathbf{a}^+(L)$  (para la reflexión) o entre componentes de  $\mathbf{a}^+(R)$  y  $\mathbf{a}^+(L)$ , multiplicando numerador y denominador por la correspondiente amplitud de onda (componente de  $\mathbf{F}_{0\ell}$ ). De esta forma obtendremos lo que llamamos coeficiente de reflexión/transmisión de amplitudes y que denotamos  $r_c/t_c$ , ver ejemplos en el capítulo 5.

Finalmente las reflectancias y transmistancias vendrán expresadas en términos de los módulos de  $r_c$  y  $t_c$  al cuadrado,  $|r_c|^2$  y  $|t_c|^2$ , respectivamente.

### Planteamiento del problema en términos de la matriz Híbrida

Si tenemos en cuenta que la matriz  $\mathbf{S}(R;L)$  puede calcularse en términos de la matriz Híbrida  $\mathbf{H}(z_R, z_L)$  mediante la expresión (3.50), entonces los coeficientes de reflexión/transmisión que resultan de las relaciones:  $\mathbf{a}^-(L) = \mathbf{S}_{11}(R;L) \cdot \mathbf{a}^+(L)$  y  $\mathbf{a}^+(R) = \mathbf{S}_{21}(R;L) \cdot \mathbf{a}^+(L)$ , pueden obtenerse en términos de  $\mathbf{H}(z_R, z_L)$ . De (4.1) y (3.50) se tiene que:

$$\begin{vmatrix} \mathbf{a}^-(L) \\ \mathbf{a}^+(R) \end{vmatrix} = [\mathbf{M}_1 - \mathbf{H}(z_R, z_L) \cdot \mathbf{M}_2]^{-1} \cdot [\mathbf{H}(z_R, z_L) \cdot \mathbf{M}_3 - \mathbf{M}_4] \cdot \begin{vmatrix} \mathbf{a}^+(L) \\ \mathbf{a}^-(R) \end{vmatrix}; \quad (4.6)$$

$$\mathbf{M}_1 = \begin{pmatrix} \mathbf{Q}_{12}(L : z_L) & \mathbf{0}_N \\ \mathbf{0}_N & \mathbf{Q}_{21}(R : z_R) \end{pmatrix}; \quad (4.7)$$

$$\mathbf{M}_2 = \begin{pmatrix} \mathbf{Q}_{22}(L : z_L) & \mathbf{0}_N \\ \mathbf{0}_N & \mathbf{Q}_{11}(R : z_R) \end{pmatrix}; \quad (4.8)$$

$$\mathbf{M}_3 = \begin{pmatrix} \mathbf{Q}_{21}(L : z_L) & \mathbf{0}_N \\ \mathbf{0}_N & \mathbf{Q}_{12}(R : z_R) \end{pmatrix}; \quad (4.9)$$

$$\mathbf{M}_4 = \begin{pmatrix} \mathbf{Q}_{11}(\mathbf{L} : z_L) & \mathbf{0}_N \\ \mathbf{0}_N & \mathbf{Q}_{22}(\mathbf{R} : z_R) \end{pmatrix}. \quad (4.10)$$

La matriz  $\mathbf{0}_N$  es la matriz nula de orden  $N \times N$ .

#### 4.1.2 Problema de escape

Considérese la configuración L – M – R de un sistema a capas, con condiciones de empalme total (FM) en la intercara L|M con coordenada  $z_L$  y en la intercara M|R con coordenada  $z_R$ . En el problema de escape debemos considerar solo ondas salientes de la región intermedia M. Aplicando las condiciones de continuidad en las intercaras podemos escribir:

$$\begin{vmatrix} \mathbf{F}(z_L)^- \\ \mathbf{A}(z_R)^+ \end{vmatrix} = \mathbf{H}(z_R, z_L) \cdot \begin{vmatrix} \mathbf{A}(z_L)^- \\ \mathbf{F}(z_R)^+ \end{vmatrix}. \quad (4.11)$$

El supraíndice  $+/-$  denota los vectores relacionados con la onda que viaja hacia la derecha/izquierda en el dominio externo R/L. A partir de las dos ecuaciones matriciales involucradas en (4.11) se puede escribir:

$$\mathbf{0}_{2N \times 1} = \begin{pmatrix} -\mathbf{I}_N & \mathbf{H}_{11}(z_R, z_L) & \mathbf{H}_{12}(z_R, z_L) & \mathbf{0}_N \\ \mathbf{0}_N & \mathbf{H}_{21}(z_R, z_L) & \mathbf{H}_{22}(z_R, z_L) & -\mathbf{I}_N \end{pmatrix} \cdot \begin{vmatrix} \mathbf{F}(z_L)^- \\ \mathbf{A}(z_L)^- \\ \mathbf{F}(z_R)^+ \\ \mathbf{A}(z_R)^+ \end{vmatrix}. \quad (4.12)$$

Expresemos los vectores que aparecen en el miembro derecho de (4.12) en la forma:

$$\begin{vmatrix} \mathbf{F}(z_L)^- \\ \mathbf{A}(z_L)^- \end{vmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_1(z_L)^- & \dots & \mathbf{F}_N(z_L)^- \\ \mathbf{A}_1(z_L)^- & \dots & \mathbf{A}_N(z_L)^- \end{bmatrix} \cdot \begin{vmatrix} a_1(\mathbf{L})^- \\ \vdots \\ a_N(\mathbf{L})^- \end{vmatrix} = \mathbf{LI}(z_L)^- \cdot \mathbf{a}(\mathbf{L})^-, \quad (4.13)$$

$$\begin{vmatrix} \mathbf{F}(z_R)^+ \\ \mathbf{A}(z_R)^+ \end{vmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_1(z_R)^+ & \dots & \mathbf{F}_N(z_R)^+ \\ \mathbf{A}_1(z_R)^+ & \dots & \mathbf{A}_N(z_R)^+ \end{bmatrix} \cdot \begin{vmatrix} a_1(\mathbf{R})^+ \\ \vdots \\ a_N(\mathbf{R})^+ \end{vmatrix} = \mathbf{LI}(z_R)^+ \cdot \mathbf{a}(\mathbf{R})^+, \quad (4.14)$$

donde  $\mathbf{F}_\ell(z_L)^-$  son soluciones LI pertenecientes al dominio L, evaluadas en  $z_L$  y  $\mathbf{F}_\ell(z_R)^+$  son soluciones LI pertenecientes al dominio R, evaluadas en  $z_R$ ;  $\mathbf{A}_\ell(z_L)^-$  y  $\mathbf{A}_\ell(z_R)^+$  son las correspondientes formas diferenciales lineales. El vector de  $N$  componentes  $\mathbf{a}(\mathbf{R})^+$  está compuesto por los coeficientes  $a_\ell(\mathbf{R})^+$  de aquellas ondas que se propagan a la derecha en R y  $\mathbf{a}(\mathbf{L})^-$  por los coeficientes  $a_\ell(\mathbf{L})^-$  de aquellas ondas que se propagan a la izquierda en L.

Entonces con ayuda de (4.13) y (4.14) transformamos el sistema (4.12) en el sistema secular:

$$\mathbf{0} = \begin{pmatrix} \mathbf{Ms}_{11} & \mathbf{Ms}_{12} \\ \mathbf{Ms}_{21} & \mathbf{Ms}_{22} \end{pmatrix} \cdot \begin{vmatrix} \mathbf{a}(\mathbf{L})^- \\ \mathbf{a}(\mathbf{R})^+ \end{vmatrix}; \quad (4.15)$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{Ms}_{11} &= \begin{bmatrix} -\mathbf{I}_N & \mathbf{H}_{11}(z_R, z_L) \end{bmatrix} \cdot \mathbf{LI}(z_L)^-, \\
\mathbf{Ms}_{12} &= \begin{bmatrix} \mathbf{H}_{12}(z_R, z_L) & \mathbf{0}_N \end{bmatrix} \cdot \mathbf{LI}(z_R)^+, \\
\mathbf{Ms}_{21} &= \begin{bmatrix} \mathbf{0}_N & \mathbf{H}_{21}(z_R, z_L) \end{bmatrix} \cdot \mathbf{LI}(z_L)^-, \\
\mathbf{Ms}_{22} &= \begin{bmatrix} \mathbf{H}_{22}(z_R, z_L) & -\mathbf{I}_N \end{bmatrix} \cdot \mathbf{LI}(z_R)^+.
\end{aligned} \tag{4.16}$$

Los eigenvalores del problema se obtienen de la ecuación secular  $\text{Det} [\mathbf{Ms}] = 0$ .

En términos de la matriz de Stiffness se obtuvo que:

$$\begin{aligned}
\mathbf{Ms}_{11} &= \begin{bmatrix} \mathbf{E}_{11}(z_R, z_L) & -\mathbf{I}_N \end{bmatrix} \cdot \mathbf{LI}(z_L)^-, \\
\mathbf{Ms}_{12} &= \begin{bmatrix} \mathbf{E}_{12}(z_R, z_L) & \mathbf{0}_N \end{bmatrix} \cdot \mathbf{LI}(z_R)^+, \\
\mathbf{Ms}_{21} &= \begin{bmatrix} \mathbf{E}_{21}(z_R, z_L) & \mathbf{0}_N \end{bmatrix} \cdot \mathbf{LI}(z_L)^-, \\
\mathbf{Ms}_{22} &= \begin{bmatrix} \mathbf{E}_{22}(z_R, z_L) & -\mathbf{I}_N \end{bmatrix} \cdot \mathbf{LI}(z_R)^+.
\end{aligned} \tag{4.17}$$

La matriz  $\mathbf{I}_N$  es la matriz identidad de orden  $N \times N$ .

## 4.2 Sistema periódico

### 4.2.1 Formulación en términos de $\mathbf{H}$

Consideremos cualquier sistema periódico en la dirección  $z$  con período  $d$  arbitrario. En principio este puede ser un cristal periódico o una superred. Las condiciones de Bloch-Floquet se cumplen tanto para  $\mathbf{F}(z)$  como para  $\mathbf{A}(z)$ , de manera que  $\mathbf{F}(z+d) = \mathbf{F}(z) e^{iqd}$  y  $\mathbf{A}(z+d) = \mathbf{A}(z) e^{iqd}$ .

En términos de la matriz híbrida podemos plantear:

$$\begin{vmatrix} \mathbf{F}(z) \\ \mathbf{A}(z+d) \end{vmatrix} = \mathbf{H}(z+d, z) \cdot \begin{vmatrix} \mathbf{A}(z) \\ \mathbf{F}(z+d) \end{vmatrix}. \tag{4.18}$$

Teniendo en cuenta las condiciones de Bloch-Floquet para  $\mathbf{F}(z)$  y  $\mathbf{A}(z)$  en (4.18), se obtiene:

$$\mathbf{A}(z) = \mathbf{H}_{11}^{-1} \cdot [\mathbf{I} - \mathbf{H}_{12} e^{iqd}] \cdot \mathbf{F}(z) \tag{4.19}$$

$$\mathbf{A}(z) = [\mathbf{I} - \mathbf{H}_{21} e^{-iqd}] \cdot \mathbf{H}_{22} \cdot \mathbf{F}(z);. \tag{4.20}$$

Para simplificar la notación hemos utilizado  $\mathbf{H}$  en lugar de  $\mathbf{H}(z+d, z)$ . De las expresiones (4.19-4.20) obtenemos el sistema secular:

$$\{ [\mathbf{I} - \mathbf{H}_{21} e^{-iqd}] \cdot \mathbf{H}_{22} - \mathbf{H}_{11}^{-1} \cdot [\mathbf{I} - \mathbf{H}_{12} e^{iqd}] \} \cdot \mathbf{F}(z) = \mathbf{0}_N, \tag{4.21}$$

el cual tendrá soluciones distintas de la trivial si el determinante:

$$\text{Det} \{ [\mathbf{I} - \mathbf{H}_{21} e^{-iqd}] \cdot \mathbf{H}_{22} - \mathbf{H}_{11}^{-1} \cdot [\mathbf{I} - \mathbf{H}_{12} e^{iqd}] \} = 0. \tag{4.22}$$

Esta ecuación nos da una relación de dispersión en términos de los elementos matriciales de  $\mathbf{H}$  para  $N$  cualquiera.

### 4.2.2 Formulación en términos de E

Realizando el mismo trabajo con  $\mathbf{E}(z+d, z)$  obtenemos el sistema secular:

$$\{[\mathbf{E}_{11} + \mathbf{E}_{12}e^{iqd}] - [\mathbf{E}_{21}e^{-iqd} + \mathbf{E}_{22}]\} \cdot \mathbf{F}(z) = \mathbf{0}_N, \quad (4.23)$$

y la relación de dispersión:

$$\text{Det} \{[\mathbf{E}_{11} + \mathbf{E}_{12}e^{iqd}] - [\mathbf{E}_{21}e^{-iqd} + \mathbf{E}_{22}]\} = 0 \quad (4.24)$$

### 4.2.3 Formulación en términos de S

Consideremos que en nuestro sistema periódico el dominio interno M (compuesto de una o varias capas) coincide con el período  $d$ , y planteemos el problema en términos de la matriz de Scattering  $\mathbf{S}(\mathbf{R}; \mathbf{L})$ .

Para los dominios externos L y R tendremos que:

$$\begin{vmatrix} \mathbf{F}(\mathbf{L} : z_L) \\ \mathbf{A}(\mathbf{L} : z_L) \end{vmatrix} = \mathbf{Q}(\mathbf{L} : z_L) \cdot \begin{vmatrix} \mathbf{a}^+(\mathbf{L}) \\ \mathbf{a}^-(\mathbf{L}) \end{vmatrix}; \quad (4.25)$$

$$\begin{vmatrix} \mathbf{F}(\mathbf{R} : z_R) \\ \mathbf{A}(\mathbf{R} : z_R) \end{vmatrix} = \mathbf{Q}(\mathbf{R} : z_R) \cdot \begin{vmatrix} \mathbf{a}^+(\mathbf{R}) \\ \mathbf{a}^-(\mathbf{R}) \end{vmatrix}. \quad (4.26)$$

Para simplificar la notación, en lo adelante utilizaremos  $\mathbf{QL}$  en lugar de  $\mathbf{Q}(\mathbf{L} : z_L)$  y  $\mathbf{QR}$  en lugar de  $\mathbf{Q}(\mathbf{R} : z_R)$ . Generalmente para construir  $\mathbf{QL}$  se utiliza una base reducida en  $z_L$  y para construir  $\mathbf{QR}$ , una base reducida en  $z_R$ .

De la condición de periodicidad de Bloch-Floquet tendremos que:

$$\begin{vmatrix} \mathbf{F}(\mathbf{R} : z_R) \\ \mathbf{A}(\mathbf{R} : z_R) \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \mathbf{F}(\mathbf{L} : z_L) \\ \mathbf{A}(\mathbf{L} : z_L) \end{vmatrix} e^{iqd} \quad (4.27)$$

Combinando (4.25), (4.26) y (4.27) con la expresión que define la matriz de Scattering (3.26) podemos escribir las expresiones:

$$\mathbf{a}^+(\mathbf{L}) = \begin{bmatrix} \mathbf{QR}_{11} \cdot \mathbf{S}_{21} - \mathbf{QL}_{11} e^{iqd} - \mathbf{QL}_{12} \cdot \mathbf{S}_{11} e^{iqd} \\ \mathbf{QL}_{12} \cdot \mathbf{S}_{12} e^{iqd} - \mathbf{QR}_{11} \cdot \mathbf{S}_{22} - \mathbf{QR}_{12} \end{bmatrix} \cdot \mathbf{a}^-(\mathbf{R}). \quad (4.28)$$

$$\mathbf{a}^+(\mathbf{L}) = \begin{bmatrix} \mathbf{QR}_{21} \cdot \mathbf{S}_{21} - \mathbf{QL}_{21} e^{iqd} - \mathbf{QL}_{22} \cdot \mathbf{S}_{11} e^{iqd} \\ \mathbf{QL}_{22} \cdot \mathbf{S}_{12} e^{iqd} - \mathbf{QR}_{21} \cdot \mathbf{S}_{22} - \mathbf{QR}_{22} \end{bmatrix} \cdot \mathbf{a}^-(\mathbf{R}). \quad (4.29)$$

Restando estas ecuaciones, obtenemos el sistema secular:

$$\mathbf{0}_N = \mathbf{Ms} \cdot \mathbf{a}^-(\mathbf{R}),$$

y de este la ecuación secular:

$$\begin{aligned} \text{Det} \left\{ \left[ \mathbf{QR}_{11} \cdot \mathbf{S}_{21} - \mathbf{QL}_{11} e^{iqd} - \mathbf{QL}_{12} \cdot \mathbf{S}_{11} e^{iqd} \right]^{-1} \cdot \right. \\ \left. \left[ \mathbf{QL}_{12} \cdot \mathbf{S}_{12} e^{iqd} - \mathbf{QR}_{11} \cdot \mathbf{S}_{22} - \mathbf{QR}_{12} \right] \right. \\ \left. - \left[ \mathbf{QR}_{21} \cdot \mathbf{S}_{21} - \mathbf{QL}_{21} e^{iqd} - \mathbf{QL}_{22} \cdot \mathbf{S}_{11} e^{iqd} \right]^{-1} \cdot \right. \\ \left. \left[ \mathbf{QL}_{22} \cdot \mathbf{S}_{12} e^{iqd} - \mathbf{QR}_{21} \cdot \mathbf{S}_{22} - \mathbf{QR}_{22} \right] \right\} = 0. \end{aligned} \quad (4.30)$$

Nótese que las ecuaciones (4.22), (4.24) y (4.30) se expresan en términos de bloques matriciales que pueden superar la inestabilidad numérica conocida como problema  $\Omega - d$ , a diferencia de la ecuación secular en términos de  $\mathbf{T}(z + d, z)$  [8]:

$$\text{Det} [\mathbf{T}(z + d, z) - \mathbf{I} e^{iqd}] = 0. \quad (4.31)$$

### Relaciones de dispersión en un sistema periódico con $N = 1$

Consideramos el caso  $N = 1$ , por ejemplo: el movimiento de electrones en un campo de potencial periódico unidimensional como el de una superred electrónica compuesta de barreras de un material  $B$  con masa efectiva  $m_B$ , ancho  $b$  y altura  $V_0$  y pozos de material  $A$  con masa efectiva  $m_A$  y ancho  $a$ . Entonces las ecuaciones (4.22), (4.24), (4.30) y (4.31) se reducen a:

$$2 \cos(qd) \mathbf{H}_{12} = 1 - \mathbf{H}_{11} \mathbf{H}_{22} + \mathbf{H}_{12}^2 \quad (4.32)$$

$$2 \cos(qd) \mathbf{E}_{12} = \mathbf{E}_{22} - \mathbf{E}_{11} \quad (4.33)$$

$$2 \cos(qd) \mathbf{S}_{12} = \frac{k_B m_A}{k_A m_B} (\mathbf{S}_{21} \mathbf{S}_{12} - \mathbf{S}_{11} \mathbf{S}_{22}) + 1 \quad (4.34)$$

$$\cos(qd) = \frac{1}{2} (\mathbf{T}_{11} + \mathbf{T}_{22}), \quad (4.35)$$

donde

$$k_A = \sqrt{\frac{2m_A}{\hbar^2} E} \quad (4.36)$$

$$(4.37)$$

$$k_B = \sqrt{\frac{2m_B}{\hbar^2} (E - V_0)}. \quad (4.38)$$

Para obtener (4.34) se hizo uso de la base  $\sin k(z - z_L/z_R)$  y  $\cos k(z - z_L/z_R)$  en el dominio L/R. Si en (4.35) sustituimos los elementos de la matriz  $\mathbf{T}$ , calculada para la ecuación de Schrödinger en el período básico  $d = a + b$ , se obtiene la conocida ecuación de KronigPenney [55]. Por su parte, las expresiones (4.32)-(4.34) constituyen variantes de esta ecuación si tenemos en cuenta que las matrices  $\mathbf{H}$ ,  $\mathbf{E}$  y  $\mathbf{S}$  pueden calcularse a partir de sus respectivas relaciones con  $\mathbf{T}$ .

Las expresiones (4.32)-(4.34) pueden considerarse transformaciones de (4.35) que permiten calcular los niveles de energía del sistema sin importar el ancho  $b$  de las barreras. En efecto, cuando el ancho de las barreras  $b \rightarrow \infty$  (límite de pozos rectangulares simétricos aislados) la ecuación secular en términos de  $\mathbf{T}$  diverge, sin embargo sus variantes nos conducen directamente a las conocidas ecuaciones trascendentes que nos dan los niveles de energía para estados pares e impares de un pozo rectangular simétrico de ancho  $a$  y profundidad  $V_0$ .



Después de un poco de álgebra se comprobó que al sustituir en (4.32) los elementos de la matriz  $\mathbf{H}$ , calculada para la ecuación de Schrödinger en el período básico  $d = a + b$  se obtiene la ecuación (32) de la referencia [56] propuesta como nueva solución para el modelo Kronig-Penney. Si ahora transformamos la ecuación (4.32) utilizando la identidad trigonométrica:

$$\tan^2 qd/2 = \frac{1 - \cos qd}{1 + \cos qd}, \quad (4.39)$$

el resultado es:

$$\tan^2 qd/2 = \frac{2\mathbf{H}_{12} - 1 + \mathbf{H}_{11}\mathbf{H}_{22} - \mathbf{H}_{12}^2}{2\mathbf{H}_{12} + 1 - \mathbf{H}_{11}\mathbf{H}_{22} + \mathbf{H}_{12}^2}. \quad (4.40)$$

De igual forma sustituyendo en (4.40) los elementos matriciales de  $\mathbf{H}$  se obtiene la ecuación (20) de la referencia [57]. Las referencias [56, 57] presentan variantes de ecuaciones de Kronig-Penney para evadir el problema  $\Omega - d$ .

# Capítulo 5

## Solución de problemas prácticos en distintos sistemas a capas

### 5.1 Sistemas piezoeléctricos multicapas: Curvas de dispersión de velocidades superficiales de ondas SH

#### 5.1.1 Introducción

Las ondas transversales horizontales SH, tales como las ondas superficiales transversales electroacústicas, pueden ser guiadas por la superficie libre [58] y por la intercara entre capas [59] de medios piezoeléctricos cuyos cristales presentan simetría 6 mm. Debido a este particular comportamiento de las ondas SH, estas encuentran aplicaciones en algunos tipos de dispositivos como sensores electromecánicos, dispositivos filtradores de ondas acústicas superficiales y transductores, de ahí el interés en el estudio de este tema en los últimos 10 años [43, 60, 61, 62, 63, 64, 65].

En esta sección el problema a resolver es el cálculo de curvas de dispersión de velocidades superficiales de ondas SH en sistemas piezoeléctricos multicapas utilizando el método de la matriz híbrida. Este problema fue abordado en [19] con la particularidad de que se empleó la técnica de descomposición del valor singular (SVD) combinada con una variante del método de la matriz Global (MMG) y escalamientos múltiples como estrategia para eliminar la inestabilidad numérica manifestada por la matriz de transferencia asociada. Los sistemas a capas estudiados están formados por dos materiales piezoeléctricos diferentes A (PZT4) y B (PZT5A) usualmente utilizados en transductores y filtros, y tienen diferentes configuraciones de capas:  $m = 3$  (A-B-A),  $m = 5$  (A-BAB-A),  $m = 7$  (A-BABAB-A) y  $m = 9$  (A-BABABAB-A). Todos estos sistemas a capas tienen la estructura L – M – R con dominios externos  $L = R \equiv A$  semi-infinitos.

Para mejorar la comprensión del problema considérese un sistema piezoeléctrico compuesto de  $m$  capas (región M) que alterna los materiales A y B, figura 5.1. Los materiales piezoeléctricos A y B presentan simetría 6 mm y sus respectivos ejes principales de orden 6 se han orientado en la dirección del eje  $x$ . Como resultado se tendrá una onda transversal polarizada en la dirección  $x$  para toda dirección de propagación en el plano  $yz$  [47], y cuya ecuación de movimiento puede ser escrita como [19]:

$$\begin{aligned} c\nabla^2 u + e\nabla^2 \phi &= \rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}; \\ e\nabla^2 u - \epsilon\nabla^2 \phi &= 0, \end{aligned} \tag{5.1}$$

donde:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2},$$

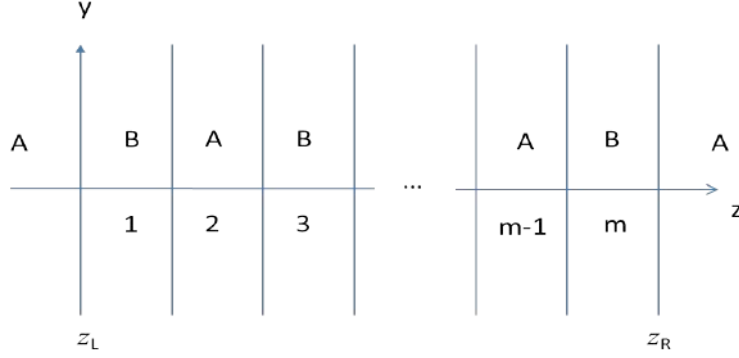


Figura 5.1: Esquema general del sistema piezoeléctrico bajo estudio. Se indican las coordenadas  $z_L$  y  $z_R$  de las intercaras que empalman la región interna compuesta de  $m$  capas con los dominios externos (semi-infinitos) compuestos de material A.

$u \equiv u_x(y, z)$  es el desplazamiento transversal en la dirección  $x$  y  $\phi \equiv \phi(y, z)$  el potencial eléctrico. Los parámetros  $\rho$ ,  $c = c_{44}$ ,  $e = e_{15}$ , y  $\epsilon = \epsilon_{11}$  son la densidad de masa, el módulo elástico, el coeficiente piezoeléctrico y la constante dieléctrica respectivamente.

### 5.1.2 Ecuación Sturm-Liouville matricial

El sistema de ecuaciones expresado en (5.1) puede ser escrito en la forma Sturm-Liouville matricial (ver apéndice K):

$$\frac{d}{dz} \left[ \mathbf{B}(z) \cdot \frac{d\mathbf{F}(z)}{dz} + \mathbf{P}(z) \cdot \mathbf{F}(z) \right] + \mathbf{Y}(z) \cdot \frac{\mathbf{F}(z)}{dz} + \mathbf{W}(z) \cdot \mathbf{F}(z) = \mathbf{0}_{2 \times 1}. \quad (5.2)$$

donde el  $\mathbf{F}(z) = [u(z), \phi(z)]^T$  y los coeficientes matriciales son:

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} c & e \\ e & -\epsilon \end{pmatrix}; \quad (5.3)$$

$$\mathbf{P} + \mathbf{Y} = \mathbf{0}; \quad (5.4)$$

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} \rho\omega^2 - c\kappa_y^2 & -e\kappa_y^2 \\ -e\kappa_y^2 & \epsilon\kappa_y^2 \end{pmatrix}. \quad (5.5)$$

Las soluciones LI del sistema (5.2) se pueden plantear en la forma:

$$\mathbf{F}(z) = \begin{vmatrix} u_0 \\ \phi_0 \end{vmatrix} e^{ikz}, \quad (5.6)$$

y obtenemos el siguiente problema cuadrático de eigenvalores (QEP) [6]:

$$(-k^2\mathbf{B} + \mathbf{W}) \cdot \begin{vmatrix} u_0 \\ \phi_0 \end{vmatrix} = \mathbf{0}_{2 \times 1}, \quad (5.7)$$

o lo que es igual:

$$\begin{bmatrix} \rho\omega^2 - c(k^2 + \kappa_y^2) & -e(k^2 + \kappa_y^2) \\ -e(k^2 + \kappa_y^2) & \epsilon(k^2 + \kappa_y^2) \end{bmatrix} \cdot \begin{vmatrix} u_0 \\ \phi_0 \end{vmatrix} = \mathbf{0}_{2 \times 1}, \quad (5.8)$$

cuyas soluciones resultan en los eigenvalores  $k_\ell$  y las correspondientes eigenfunciones  $\mathbf{F}_\ell(z)$ . Como la matriz  $\mathbf{B}$  es *regular* ( $\text{Det} [\mathbf{B}] \neq 0$ ) tendremos un conjunto de eigenvalores  $K = \{k_\ell, \ell = 1, 2, 3, 4\}$  y las correspondientes eigenfunciones:

$$\mathbf{F}_\ell(z) = \begin{vmatrix} u_{0,\ell} \\ \phi_{0,\ell} \end{vmatrix} e^{ik_\ell z}. \quad (5.9)$$

En este caso tenemos que  $(\mathbf{P} + \mathbf{Y}) = 0$ , y los eigenvalores  $k$  formarán pares del tipo  $(k_\ell; -k_\ell)$ :

$$\begin{aligned} k_1 &= -i\kappa_y = -i\frac{\omega}{v_s} \\ k_2 &= -k_1 \\ k_3 &= -\sqrt{-\kappa_y^2 + \omega^2 \frac{\rho}{(c + \frac{e^2}{\epsilon})}} = -i\omega \sqrt{\frac{1}{v_s^2} - \frac{1}{v_{TH}^2}} \\ k_4 &= -k_3. \end{aligned} \quad (5.10)$$

Aquí  $v_s$  es la velocidad superficial y  $v_{TH} = \sqrt{(c + \frac{e^2}{\epsilon})/\rho}$  es la velocidad de la onda SH. Se puede comprobar que para  $k_1$  y  $k_2$  podemos tomar:

$$\mathbf{F}_\ell(z) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{ik_\ell z}; \quad \ell = 1, 2, \quad (5.11)$$

y para  $k_3$  y  $k_4$ , podemos tomar:

$$\mathbf{F}_\ell(z) = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{e}{\epsilon} \end{pmatrix} e^{ik_\ell z}; \quad \ell = 3, 4. \quad (5.12)$$

En forma abreviada:

$$\mathbf{F}_\ell(z) = \mathbf{F}_{0\ell} e^{ik_\ell z}; \quad \ell = 1, 2, 3, 4. \quad (5.13)$$

Las formas lineales  $\mathbf{A}_\ell(z)$  obtenidas a partir de  $\mathbf{F}_\ell(z)$  son:

$$\mathbf{A}_\ell(z) = ik_\ell \begin{pmatrix} e \\ -\epsilon \end{pmatrix} e^{ik_\ell z}; \quad \ell = 1, 2, \quad (5.14)$$

y

$$\mathbf{A}_\ell(z) = ik_\ell \begin{pmatrix} \rho v^2 \\ 0 \end{pmatrix} e^{ik_\ell z}; \quad \ell = 3, 4. \quad (5.15)$$

En forma abreviada:

$$\mathbf{A}_\ell(z) = \mathbf{A}_{0\ell} e^{ik_\ell z}; \quad \ell = 1, 2, 3, 4. \quad (5.16)$$

En lo adelante se utilizará el subíndice  $A/B$  para indicar el material de la capa o dominio donde se trabaja. Por ejemplo, para un dominio  $\alpha$  ( $\alpha = A, B$ ) la solución de (5.2) puede plantearse:

$$\mathbf{F}(\alpha : z) = a_1(\alpha) \mathbf{F}_{1\alpha}(z) + a_2(\alpha) \mathbf{F}_{2\alpha}(z) + a_3(\alpha) \mathbf{F}_{3\alpha}(z) + a_4(\alpha) \mathbf{F}_{4\alpha}(z), \quad (5.17)$$

donde  $a_1, a_2, a_3$  y  $a_4$  es un conjunto de coeficientes de expansión.

### 5.1.3 Condiciones de contorno

Para obtener modos confinados se asumió que no hay ondas entrantes en la región interna M mientras que las ondas salientes son evanescentes [19]. Para obtener ondas salientes evanescentes es necesario que los eigenvalores  $k_3$  y  $k_4$  sean imaginarios. Como estas ondas salientes viajan en medios de material A,

de la expresión para  $k_3$  en (5.10) se obtiene que  $v_s < v_{THA}$ . Dentro de la heteroestructura es posible considerar modos confinados si existen capas donde  $k_3$  y  $k_4$  son reales. Esto solo es posible en capas de material B cuando  $v_{THB} < v_s$ .

Expresemos (5.17) para el dominio  $R \equiv A$  utilizando una base reducida en  $z_R$ . Sustituyendo las expresiones de los eigenvalores (5.10) en (5.17) tendremos que:

$$\begin{aligned} \mathbf{F}(R : z) = & a_1(R) \mathbf{F}_{01A} e^{\frac{\omega}{v_s}(z-z_R)} + a_2(R) \mathbf{F}_{02A} e^{-\frac{\omega}{v_s}(z-z_R)} \\ & + a_3(R) \mathbf{F}_{03A} e^{\omega \sqrt{\frac{1}{v_s^2} - \frac{1}{v_{THA}^2}}(z-z_R)} + a_4(R) \mathbf{F}_{04A} e^{-\omega \sqrt{\frac{1}{v_s^2} - \frac{1}{v_{THA}^2}}(z-z_R)}, \end{aligned} \quad (5.18)$$

entonces en coherencia con la condición de modos confinados tendremos que:

$$\mathbf{F}(R : z) = a_2(R) \mathbf{F}_{02A} e^{-\frac{\omega}{v_s}(z-z_R)} + a_4(R) \mathbf{F}_{04A} e^{-\omega \sqrt{\frac{1}{v_s^2} - \frac{1}{v_{THA}^2}}(z-z_R)}. \quad (5.19)$$

De forma análoga, para el dominio  $L \equiv A$  utilizando una base reducida en  $z_L$  la condición de modos confinados implica que:

$$\mathbf{F}(L : z) = a_1(L) \mathbf{F}_{01A} e^{\frac{\omega}{v_s}(z-z_L)} + a_3(L) \mathbf{F}_{03A} e^{\omega \sqrt{\frac{1}{v_s^2} - \frac{1}{v_{THA}^2}}(z-z_L)}. \quad (5.20)$$

Las condiciones aquí planteadas (solo ondas salientes evanescentes) son un caso particular del problema de escape cuya formulación fue planteada en términos de la matriz híbrida en la sección 4.1.2.

#### 5.1.4 Cálculo de curvas de dispersión de velocidades superficiales de ondas SH en términos de la matriz $\mathbf{T}$ ( $4 \times 4$ )

Llamemos  $\mathbf{T}_\alpha$  a la matriz  $\mathbf{T}$  que relaciona el campo  $\mathbf{F}(z)$  y la forma diferencial lineal  $\mathbf{A}(z)$  en los extremos de una capa de material  $\alpha = A/B$  delimitada por las coordenadas  $z_0$  y  $z_0 + d$ , donde  $d$  es el espesor de las capas. Para determinarla utilizaremos la expresión (3.7) que permite determinar la matriz  $\mathbf{T}$  en un dominio donde se conoce una base de soluciones LI. Para este caso tendremos:

$$\mathbf{T}_\alpha = \mathbf{Q}_\alpha(z_0 + d) \cdot \mathbf{Q}_\alpha(z_0)^{-1}; \quad (5.21)$$

$$\begin{vmatrix} \mathbf{F}(z_0 + d) \\ \mathbf{A}(z_0 + d) \end{vmatrix} = \mathbf{T}_\alpha \cdot \begin{vmatrix} \mathbf{F}(z_0) \\ \mathbf{A}(z_0) \end{vmatrix}. \quad (5.22)$$

Utilizando una base de soluciones LI reducida en  $z_0$  de (5.21) tendremos que:

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_\alpha = & \begin{pmatrix} \mathbf{F}_{01\alpha} e^{ik_{1\alpha} d} & \mathbf{F}_{02\alpha} e^{-ik_{1\alpha} d} & \mathbf{F}_{03\alpha} e^{ik_{3\alpha} d} & \mathbf{F}_{04\alpha} e^{-ik_{3\alpha} d} \\ \mathbf{A}_{01\alpha} e^{ik_{1\alpha} d} & \mathbf{A}_{02\alpha} e^{-ik_{1\alpha} d} & \mathbf{A}_{03\alpha} e^{ik_{3\alpha} d} & \mathbf{A}_{04\alpha} e^{-ik_{3\alpha} d} \end{pmatrix} \\ & \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{F}_{01\alpha} & \mathbf{F}_{02\alpha} & \mathbf{F}_{03\alpha} & \mathbf{F}_{04\alpha} \\ \mathbf{A}_{01\alpha} & \mathbf{A}_{02\alpha} & \mathbf{A}_{03\alpha} & \mathbf{A}_{04\alpha} \end{pmatrix}^{-1}. \end{aligned} \quad (5.23)$$

El primer factor en esta expresión se puede descomponer en el producto:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{F}_{01\alpha} & \mathbf{F}_{02\alpha} & \mathbf{F}_{03\alpha} & \mathbf{F}_{04\alpha} \\ \mathbf{A}_{01\alpha} & \mathbf{A}_{02\alpha} & \mathbf{A}_{03\alpha} & \mathbf{A}_{04\alpha} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} e^{ik_{1\alpha} d} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-ik_{1\alpha} d} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{ik_{3\alpha} d} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-ik_{3\alpha} d} \end{pmatrix}, \quad (5.24)$$

de manera que se puede comprobar directamente que  $\text{Det}[\mathbf{T}_\alpha] = 1$ . Sea  $\mathbf{T}(z_R, z_L)$  la matriz que relaciona el campo y la forma lineal en los extremos de la heteroestructura en estudio:

$$\begin{vmatrix} \mathbf{F}(z_R) \\ \mathbf{A}(z_R) \end{vmatrix} = \mathbf{T}(z_R, z_L) \cdot \begin{vmatrix} \mathbf{F}(z_L) \\ \mathbf{A}(z_L) \end{vmatrix}, \quad (5.25)$$

dicha matriz se calcula utilizando la regla de composición correspondiente (3.13). Comenzando por el extremo izquierdo de la figura 5.1 para las diferentes configuraciones tendremos que:

$$\mathbf{T}(z_R, z_L) = \mathbf{T}_B; \text{ para } A - B - A; \quad (5.26)$$

$$\mathbf{T}(z_R, z_L) = \mathbf{T}_B \cdot \mathbf{T}_A \cdot \mathbf{T}_B; \text{ para } A - BAB - A; \quad (5.27)$$

$$\mathbf{T}(z_R, z_L) = \mathbf{T}_B \cdot \mathbf{T}_A \cdot \mathbf{T}_B \cdot \mathbf{T}_A \cdot \mathbf{T}_B; \text{ para } A - BABAB - A; \quad (5.28)$$

$$\mathbf{T}(z_R, z_L) = \mathbf{T}_B \cdot \mathbf{T}_A \cdot \mathbf{T}_B \cdot \mathbf{T}_A \cdot \mathbf{T}_B \cdot \mathbf{T}_A \cdot \mathbf{T}_B; \text{ para } A - BABABAB - A. \quad (5.29)$$

Sustituyendo (5.19) y (5.20) en (5.25), después de un poco de algebra sencilla se obtiene el sistema secular:

$$[\mathbf{M}_1 - \mathbf{T}(z_R, z_L) \cdot \mathbf{M}_2] \cdot \begin{vmatrix} a_1(L) \\ a_3(L) \\ a_2(R) \\ a_4(R) \end{vmatrix} = \mathbf{0}_{4 \times 1}, \quad (5.30)$$

donde:

$$\mathbf{M}_1 = \begin{pmatrix} \mathbf{0}_{2 \times 1} & \mathbf{0}_{2 \times 1} & \mathbf{F}_{02A} & \mathbf{F}_{04A} \\ \mathbf{0}_{2 \times 1} & \mathbf{0}_{2 \times 1} & \mathbf{A}_{02A} & \mathbf{A}_{04A} \end{pmatrix}; \quad (5.31)$$

$$\mathbf{M}_2 = \begin{pmatrix} \mathbf{F}_{01A} & \mathbf{F}_{03A} & \mathbf{0}_{2 \times 1} & \mathbf{0}_{2 \times 1} \\ \mathbf{A}_{01A} & \mathbf{A}_{03A} & \mathbf{0}_{2 \times 1} & \mathbf{0}_{2 \times 1} \end{pmatrix}. \quad (5.32)$$

Para que el sistema (5.30) tenga soluciones diferentes de la trivial los valores de velocidad superficial ( $v_s$ ) y de frecuencia  $\omega$  deben ser tales que el determinante de la matriz secular sea nulo:

$$\text{Det} [\mathbf{Ms}] = 0; \quad \mathbf{Ms} = \mathbf{M}_1 - \mathbf{T}(z_R, z_L) \cdot \mathbf{M}_2. \quad (5.33)$$

Esta ecuación secular permitirá el cálculo de las curvas de dispersión, es decir la relación entre la velocidad superficial ( $v_s$ ) y la frecuencia  $\omega$ .

### 5.1.5 Cálculo de curvas de dispersión de velocidades superficiales de ondas SH en términos de la matriz híbrida $\mathbf{H}$ ( $4 \times 4$ )

Llamemos  $\mathbf{H}_\alpha$  a la matriz  $\mathbf{H}$  que relaciona el campo  $\mathbf{F}(z)$  y la forma diferencial lineal  $\mathbf{A}(z)$  en los extremos de una capa de material  $\alpha = A/B$  delimitada por las coordenadas  $z_0$  y  $z_0 + d$ , donde  $d$  es el espesor de las capas. Para determinarla utilizaremos la expresión (3.34) que permite determinar la matriz  $\mathbf{H}$  para un dominio donde se conoce una base de soluciones LI. Para este caso tendremos:

$$\mathbf{H}_\alpha = \mathbf{U}^{FA}(z_0 + d, z_0) \cdot [\mathbf{U}^{AF}(z_0 + d, z_0)]^{-1}; \quad (5.34)$$

$$\begin{vmatrix} \mathbf{F}(z_0) \\ \mathbf{A}(z_0 + d) \end{vmatrix} = \mathbf{H}_\alpha \cdot \begin{vmatrix} \mathbf{A}(z_0) \\ \mathbf{F}(z_0 + d) \end{vmatrix}. \quad (5.35)$$

Utilizando una base de soluciones LI reducida en  $z_0$ , de (5.34) tendremos que:

$$\mathbf{H}_\alpha = \begin{pmatrix} \mathbf{F}_{01\alpha} & \mathbf{F}_{02\alpha} & \mathbf{F}_{03\alpha} & \mathbf{F}_{04\alpha} \\ \mathbf{A}_{01\alpha} e^{ik_{1\alpha} d} & \mathbf{A}_{02\alpha} e^{-ik_{1\alpha} d} & \mathbf{A}_{03\alpha} e^{ik_{3\alpha} d} & \mathbf{A}_{04\alpha} e^{-ik_{3\alpha} d} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{01\alpha} & \mathbf{A}_{02\alpha} & \mathbf{A}_{03\alpha} & \mathbf{A}_{04\alpha} \\ \mathbf{F}_{01\alpha} e^{ik_{1\alpha} d} & \mathbf{F}_{02\alpha} e^{-ik_{1\alpha} d} & \mathbf{F}_{03\alpha} e^{ik_{3\alpha} d} & \mathbf{F}_{04\alpha} e^{-ik_{3\alpha} d} \end{pmatrix}^{-1}. \quad (5.36)$$

Sea  $\mathbf{H}(z_R, z_L)$  la matriz que relaciona el campo y la forma lineal en los extremos de la heteroestructura en estudio:

$$\begin{vmatrix} \mathbf{F}(z_L) \\ \mathbf{A}(z_R) \end{vmatrix} = \mathbf{H}(z_R, z_L) \cdot \begin{vmatrix} \mathbf{A}(z_L) \\ \mathbf{F}(z_R) \end{vmatrix}, \quad (5.37)$$

dicha matriz se calculó utilizando la regla de composición correspondiente (3.60). Comenzando por el extremo izquierdo de la figura 5.1 para las diferentes configuraciones tendremos que:

$$\mathbf{H}(z_R, z_L) = \mathbf{H}_B; \text{ para } A - B - A; \quad (5.38)$$

$$\mathbf{H}(z_R, z_L) = \mathbf{H}_B \otimes \left\{ \mathbf{H}_A \otimes \mathbf{H}_B \right\} = \mathbf{H}_3; \text{ para } A - BAB - A; \quad (5.39)$$

$$\mathbf{H}(z_R, z_L) = \mathbf{H}_B \otimes \left\{ \mathbf{H}_A \otimes \mathbf{H}_3 \right\} = \mathbf{H}_5; \text{ para } A - BABAB - A; \quad (5.40)$$

$$\mathbf{H}(z_R, z_L) = \mathbf{H}_B \otimes \left\{ \mathbf{H}_A \otimes \mathbf{H}_5 \right\} = \mathbf{H}_7; \text{ para } A - BABABAB - A. \quad (5.41)$$

A partir de la formulación del problema de escape en términos de la matriz híbrida (sección 4.1.2) podemos plantear el siguiente sistema secular:

$$\mathbf{0}_{4 \times 1} = \begin{pmatrix} \mathbf{Ms}_{11} & \mathbf{Ms}_{12} \\ \mathbf{Ms}_{21} & \mathbf{Ms}_{22} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_1(\text{L}) \\ a_3(\text{L}) \\ a_2(\text{R}) \\ a_4(\text{R}) \end{pmatrix}, \quad (5.42)$$

donde:

$$\mathbf{Ms}_{11} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & \mathbf{H}(z_R, z_L)_{11} & \mathbf{H}(z_R, z_L)_{12} \\ 0 & -1 & \mathbf{H}(z_R, z_L)_{21} & \mathbf{H}(z_R, z_L)_{22} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{F}_{01A} & \mathbf{F}_{03A} \\ \mathbf{A}_{01A} & \mathbf{A}_{03A} \end{pmatrix}; \quad (5.43)$$

$$\mathbf{Ms}_{12} = \begin{pmatrix} \mathbf{H}(z_R, z_L)_{13} & \mathbf{H}(z_R, z_L)_{14} & 0 & 0 \\ \mathbf{H}(z_R, z_L)_{23} & \mathbf{H}(z_R, z_L)_{24} & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{F}_{02A} & \mathbf{F}_{04A} \\ \mathbf{A}_{02A} & \mathbf{A}_{04A} \end{pmatrix}; \quad (5.44)$$

$$\mathbf{Ms}_{21} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \mathbf{H}(z_R, z_L)_{31} & \mathbf{H}(z_R, z_L)_{32} \\ 0 & 0 & \mathbf{H}(z_R, z_L)_{41} & \mathbf{H}(z_R, z_L)_{42} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{F}_{01A} & \mathbf{F}_{03A} \\ \mathbf{A}_{01A} & \mathbf{A}_{03A} \end{pmatrix}; \quad (5.45)$$

$$\mathbf{Ms}_{22} = \begin{pmatrix} \mathbf{H}(z_R, z_L)_{33} & \mathbf{H}(z_R, z_L)_{34} & -1 & 0 \\ \mathbf{H}(z_R, z_L)_{43} & \mathbf{H}(z_R, z_L)_{44} & 0 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{F}_{02A} & \mathbf{F}_{04A} \\ \mathbf{A}_{02A} & \mathbf{A}_{04A} \end{pmatrix}. \quad (5.46)$$

La ecuación secular  $\text{Det} [\mathbf{Ms}] = 0$  permitirá el cálculo de las curvas de dispersión, es decir la relación entre la velocidad superficial ( $v_s$ ) y la frecuencia  $\omega$ .

### 5.1.6 Resultados de los cálculos numéricos

Se realizaron cálculos para las configuraciones  $m = 3$  (A-B-A),  $m = 5$  (A-BAB-A) y  $m = 9$  (A-BABABAB-A) capas. Las propiedades de los materiales A y B se listan en la tabla 5.1. El espesor de las capas es el mismo  $d = 0.1$  mm.

Para construir las curvas de dispersión ( $v_s$  vs.  $\omega$ ) se tomaron valores de frecuencia entre 20 MHz y 400 MHz y para cada valor de frecuencia se determinaron aquellos valores de velocidad superficial ( $v_{THB} < v_s < v_{THA}$ ) para los que se cumple que el módulo del determinante de la matriz secular se anula:

$$\text{Det} [\mathbf{Ms}] = 0. \quad (5.47)$$

### Comportamiento de la estabilidad numérica de la matriz $\mathbf{T}$ con el incremento de la frecuencia en el cálculo de velocidades superficiales

El valor absoluto del determinante de la matriz secular en términos de la matriz  $\mathbf{T}$  fue calculado en el intervalo  $v_{THB} < v_s < v_{THA}$  para el sistema  $m = 9$  (A-BABABAB-A) a las frecuencias: 20 MHz, 80 MHz y 200 MHz. Los resultados se muestran en las figuras 5.2, 5.3 y 5.4 respectivamente.

	$c$ (N/m <sup>2</sup> )	$e$ (C/m <sup>2</sup> )	$\epsilon$ (C <sup>2</sup> /N m <sup>2</sup> )	$\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )	$v_{TH}$ (m/s)
PZT4 (A)	$2.56 \times 10^2$	12.72	$3.8997 \times 10^{-9}$	7500	2352
PZT5A (B)	$2.11 \times 10^2$	12.32	$3.8175 \times 10^{-9}$	7750	2265

Tabla 5.1: Propiedades de los materiales piezoeléctricos PZT4 (A) y PZT5A (B).

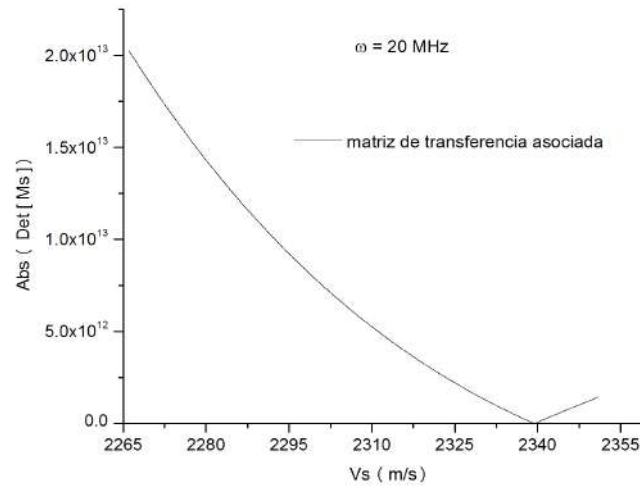


Figura 5.2: Determinación de la velocidad superficial a  $\omega = 20$  MHz utilizando la matriz de transferencia asociada. Sistema  $m = 9$  (A-BABABAB-A). La velocidad así determinada es  $v_s = 2339.4$  m/s.

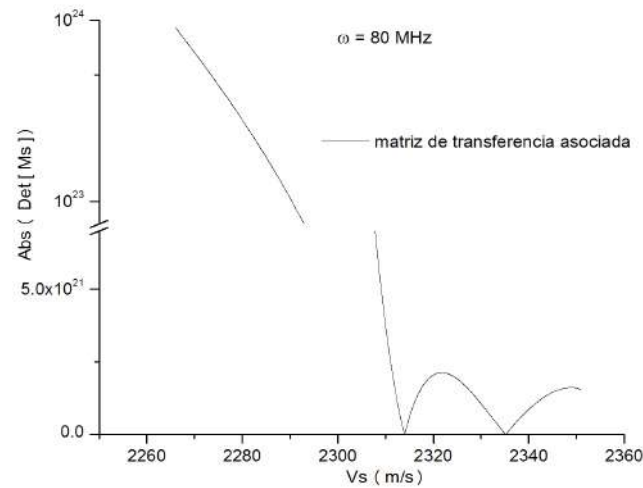


Figura 5.3: Determinación de la velocidad superficial a  $\omega = 80$  MHz utilizando la matriz de transferencia asociada. Sistema  $m = 9$  (A-BABABAB-A). Las velocidades así determinadas son  $v_s = 2313.96$  m/s y  $v_s = 2335.12$  m/s.



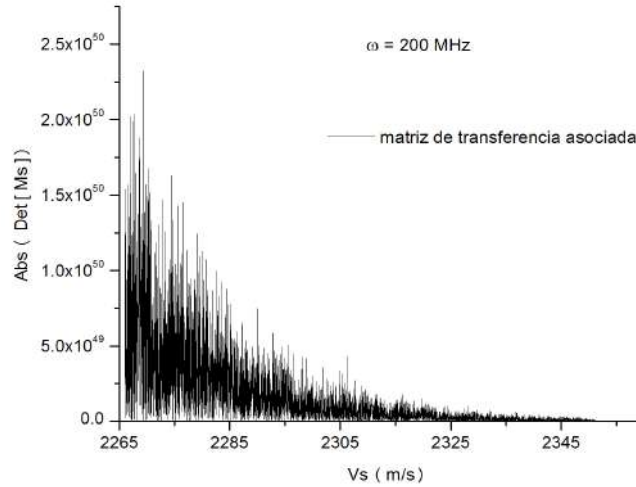


Figura 5.4: Inestabilidad numérica de la matriz de transferencia asociada manifestada gráficamente a  $\omega = 200$  MHz. Sistema  $m = 9$  (A-BABABAB-A).

Para 20 MHz se obtuvo  $v_s = 2339.39$  m/s asumiendo que el *cero numérico* está en el orden de  $10^8$ . En este caso el valor absoluto del determinante de la matriz  $\mathbf{T}(z_R, z_L)$  es 1 ( $|\text{Det} [\mathbf{T}(z_R, z_L)]| = 1$ ). A 80 MHz (figura 5.3) se obtuvo  $v_s = 2313.96$  m/s y  $v_s = 2335.12$  m/s asumiendo que el *cero numérico* está en el orden de  $10^{18}$ . Estos valores de velocidad a 20 y 80 MHz coinciden con los reportados en [19]  $v_s = 2339$  (20 MHz) y  $v_s = 2314$  m/s,  $v_s = 2335$  m/s (80 MHz). Sin embargo como indica la figura 5.4 a 200 MHz el método de la matriz  $\mathbf{T}$  ya no es útil para determinar las velocidades superficiales.

Si bien a 200 MHz la inestabilidad numérica impide la determinación de la velocidad  $v_s$ , a 80 MHz esta parece manifestarse en el incremento significativo del valor del *cero numérico* ( $\sim 10^{18}$ ) con respecto al *cero numérico* a 20 MHz ( $\sim 10^8$ ). A 80 MHz el orden de  $|\text{Det} [\mathbf{T}(z_R, z_L)]|$  se encuentra entre  $10^4$  y  $10^5$  y a 200 MHz entre  $10^{46}$  y  $10^{53}$ .

### Cálculo de velocidades superficiales utilizando el método de la matriz híbrida. Curvas de dispersión

Las figuras 5.5 y 5.6 calculadas para 200 MHz y 400 MHz respectivamente indican que la matriz híbrida evade la inestabilidad numérica que manifiesta la matriz  $\mathbf{T}$ . En todos los cálculos con  $\mathbf{H}$  el *cero numérico* está en el orden de  $10^8$ . Los sistemas con  $m = 3$ ,  $m = 5$ ,  $m = 7$  y  $m = 9$  son simétricos; por tanto, los modos de vibración pueden ser clasificados en modos pares y modos impares. Dichas soluciones aparecen en forma alternada. La figura 5.6 muestra los valores de velocidad  $v_s$  correspondientes a la primera banda de modos pares y a la primera banda de modos impares.

Para verificar resultados se compararon los valores de velocidad superficial obtenidos mediante el método de la matriz  $\mathbf{H}$  con valores reportados en [19] utilizando la técnica de descomposición del valor singular (SVD) combinada con una variante del método de la matriz Global (MMG) y escalamientos múltiples, ver tabla 5.2. A diferencia del MMG empleado en [19] cuyas matrices varían el orden según el número de capas del sistema, la matriz  $\mathbf{H}$  empleada en nuestros cálculos es de orden  $4 \times 4$  independientemente del número de capas. Para la configuración  $m = 3$  (A-B-A) el orden de las matrices del MMG es  $8 \times 8$  y para la configuración  $m = 9$  (A-BABABAB-A) el orden es  $32 \times 32$ .

La similitud entre los conjuntos de velocidades obtenidas por ambos métodos (MMG) y  $\mathbf{H}$  muestra la capacidad del método de la matriz  $\mathbf{H}$  para evadir el problema  $\Omega - d$  con menos requerimientos formales

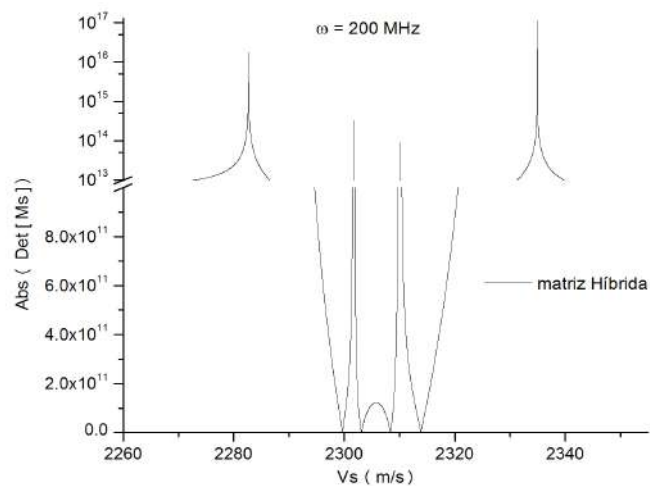


Figura 5.5: Determinación de la velocidad superficial a  $\omega = 200$  MHz utilizando el método de la matriz híbrida. Sistema  $m = 9$  (A-BABABAB-A). Las velocidades así determinadas son  $v_s = 2299.66$  m/s,  $v_s = 2303.13$  m/s,  $v_s = 2308.33$  m/s y  $v_s = 2313.84$  m/s.

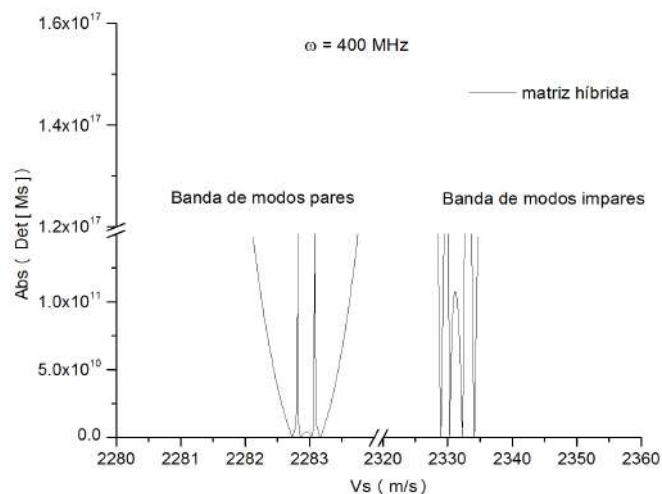


Figura 5.6: Determinación de la velocidad superficial a  $\omega = 400$  MHz utilizando el método de la matriz híbrida. Sistema  $m = 9$  (A-BABABAB-A). Se observan la primera banda de modos pares y la primera banda de modos impares, cada una con cuatro valores de  $v_s$ .

No. de capas	$\omega$ (MHz)	MMG y SVD vs (m/s)	H vs (m/s)
3	123.1	2324	2324.08
	357.1	2286	2285.94
5	123.1	2313.6	2313.9
		2340.5	2340.8
	279.1	2292.6	2292.5
		2294.5	2294.7
	318.1	2343.1	2344.1
		2350.7	2351.0
9	396.1	2330.3	2330.3
		2333.6	2333.8
	20	2339	2339.4
	80	2314	2314.0
		2335	2335.2

Tabla 5.2: Comparación entre los valores de velocidad superficial de la onda TH obtenidos para diferentes frecuencias por dos métodos teóricos diferentes: (**MMG**) *Método de la matriz Global* y (**SVD**) *Técnica de descomposición del valor singular*. (**H**) *Método de la matriz híbrida*.

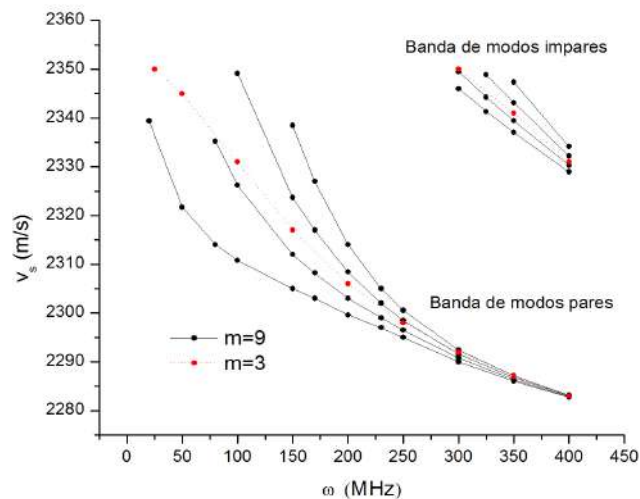


Figura 5.7: Curvas de dispersión para los sistemas  $m = 3$  (A-B-A) y  $m = 9$  (A-BABABAB-A) obtenidas utilizando el método de la matriz híbrida. Se muestran la primera banda de modos pares y la primera banda de modos impares.

y de cómputo en comparación con el método de la matriz Global.

La figura 5.7 muestra las curvas de dispersión para los sistemas  $m = 3$  (A-B-A) y  $m = 9$  (A-BABABAB-A) obtenidas utilizando el método de la matriz híbrida. Se observan dos bandas, la primera banda de modos pares y la primera banda de modos impares, así como la convergencia de los modos del sistema  $m = 9$  hacia los modos del sistema  $m = 3$  con el incremento de la frecuencia. Este comportamiento está presente en las curvas reportadas en [19].

## 5.2 Cristales fonónicos unidimensionales: Determinación de bandas prohibidas de ondas elásticas

### 5.2.1 Introducción

Por cristal fonónico se entiende una heteroestructura elástica/acústica periódica artificial que exhibe bandas fonónicas prohibidas. Por su analogía con las bandas fotónicas prohibidas en cristales naturales o artificiales esta propiedad de los cristales fonónicos ha sido objeto de gran atención e investigación [66, 67, 68]. Las bandas elásticas/acústicas prohibidas tienen numerosas aplicaciones potenciales en el campo de la ingeniería tales como filtros acústicos, control del aislamiento de vibraciones, la supresión de sonidos y el diseño de nuevos transductores.

El cristal fonónico unidimensional a analizar es el sistema estudiado en [67] mediante el método de la matriz de transferencia asociada  $\mathbf{T}$ . Su esquema se muestra en la figura 5.8. De acuerdo con nuestra notación trazamos el eje  $z$  en la dirección perpendicular a las intercaras de la heteroestructura. El sistema está formado por  $m$  celdas unitarias; la celda consta de dos capas (una capa hecha de material A y la otra de material B). Denotamos con  $d_A$  el espesor de la capa de material A y con  $d_B$  el espesor de la capa de material B. El material de las capas se considera isotrópico y homogéneo de manera que las propiedades elásticas de estos quedan especificadas por las constantes de Lamé [41]:  $\lambda$  y  $\mu$ .

Se analizarán dos situaciones: 1) cristales fonónicos perfectamente periódicos y 2) cristales fonónicos desordenados con el espesor  $d_A$  variando aleatoriamente en el intervalo uniformemente distribuido:

$$d_A \in \left[ \bar{d}_A(1 - \sqrt{3}\delta), \bar{d}_A(1 + \sqrt{3}\delta) \right], \quad (5.48)$$

donde  $\bar{d}_A$  es el valor medio del espesor de las capas de material A ( $\bar{d}_A = d_A$  para estructuras perfectamente periódicas);  $\delta$  define como el grado de desorden del sistema. Para expresar  $d_A$  en términos de  $\bar{d}_A$  se introduce una variable aleatoria típica uniformemente distribuida,  $t \in (0, 1)$ , entonces  $d_A$  se puede expresar como [67]:

$$d_A = \bar{d}_A \left[ 1 + \sqrt{3}\delta(2t - 1) \right]. \quad (5.49)$$

De acuerdo con cálculos reportados en [67] el coeficiente de transmisión para el desplazamiento en la dirección  $x$  (eje  $z$  en nuestra notación) de una onda longitudinal que incide bajo un ángulo  $\theta = 40^\circ$  supera el valor 1 en determinados intervalos de frecuencia (figura 8 de [67]). Nuestro estudio de este sistema releva que incluso para  $\theta = 40^\circ$  donde los eigenvalores son reales, la matriz  $\mathbf{T}$  manifiesta el problema  $\Omega-d$  en determinados intervalos de frecuencias y esta inestabilidad numérica puede ser la causa de valores de coeficientes de transmisión superiores a 1. También mostraremos que esta degradación numérica puede ser evadida utilizando el método de la matriz híbrida o el método de la matriz de dispersión.

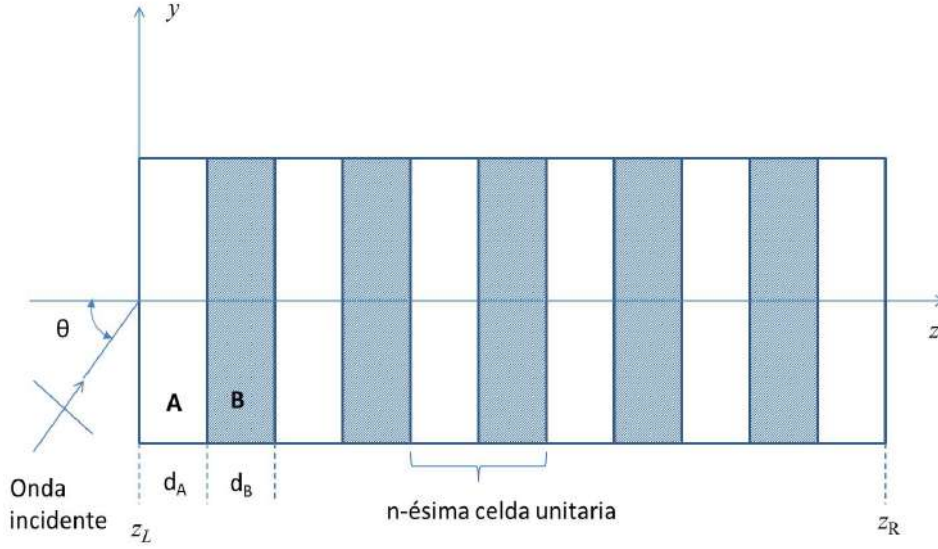


Figura 5.8: Esquema general de un cristal fonónico unidimensional.

### 5.2.2 Ecuación Sturm-Liouville matricial

La ecuación de la onda elástica en un sólido es el resultado de la segunda ley de Newton y de la ley de Hooke [41]:

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = c_{ijkl} \frac{\partial^2 u_l}{\partial x_j \partial x_k}; \quad (i, j, k, l) = 1, 2, 3. \quad (5.50)$$

Aquí  $u_1$ ,  $u_2$  y  $u_3$  son las componentes del desplazamiento de un punto arbitrario en el sólido;  $c_{ijkl}$  son las componentes del tensor de rigidez (tensor elástico) y  $\rho$  la densidad del masa del material. Se trata de un sistema de tres ecuaciones diferenciales de segundo orden acopladas.

Para el caso de un medio isotrópico tenemos que [41]:

$$c_{ijkl} \Leftrightarrow c_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} \Gamma & \lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \Gamma & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda & \Gamma & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mu \end{pmatrix}, \quad (5.51)$$

donde  $\Gamma = \lambda + 2\mu$ . Se considera el medio homogéneo. La relación entre subíndices  $\alpha \leftrightarrow (ij)$  y  $\beta \leftrightarrow (kl)$  se explica en el apéndice L. En lo adelante, para facilitar la comprensión del problema se utilizará la notación  $u_x$ ,  $u_y$ ,  $u_z$  en lugar de  $u_1$ ,  $u_2$ ,  $u_3$  respectivamente y  $x$ ,  $y$ ,  $z$  en lugar de  $x_1$ ,  $x_2$ ,  $x_3$ .

Sustituyendo (5.51) en (5.50) y planteando la solución en la forma:  $\vec{u}(x, y, z) = \vec{u}(z) e^{i(\kappa_x x + \kappa_y y - \omega t)}$  donde  $\vec{u} = [u_x, u_y, u_z]^T$  se obtiene el sistema de ecuaciones (ver apéndice M):

$$\begin{aligned} \mu \frac{d^2 u_x}{dz^2} + i\kappa_x(\lambda + \mu) \frac{du_z}{dz} + (\rho\omega^2 - \Gamma\kappa_x^2 - \mu\kappa_y^2) u_x \\ - (\lambda + \mu)\kappa_x\kappa_y u_y = 0; \end{aligned} \quad (5.52)$$

$$\mu \frac{d^2 u_y}{dz^2} + i\kappa_y(\lambda + \mu) \frac{du_z}{dz} + (\rho\omega^2 - \mu\kappa_x^2 - \Gamma\kappa_y^2) u_y - (\mu + \lambda)\kappa_x\kappa_y u_x = 0; \quad (5.53)$$

$$\Gamma \frac{d^2 u_z}{dz^2} + i\kappa_x(\mu + \lambda) \frac{du_x}{dz} + i\kappa_y(\mu + \lambda) \frac{du_y}{dz} + (\rho\omega^2 - \mu\kappa_x^2 - \mu\kappa_y^2) u_z = 0. \quad (5.54)$$

Como los medios que tratamos son isotrópicos podemos seleccionar el vector de onda  $\vec{\kappa} = (\kappa_x, \kappa_y)$  como  $\vec{\kappa} = (0, \kappa_y)$  sin perder generalidad. Entonces se puede verificar directamente que el sistema de ecuaciones (5.52)-(5.54) se desacopla en una ecuación independiente para la componente  $u_x$  y en el sistema de dos ecuaciones acopladas:

$$\mu \frac{d^2 u_y}{dz^2} + i\kappa_y(\lambda + \mu) \frac{du_z}{dz} + (\rho\omega^2 - \Gamma\kappa_y^2) u_y = 0; \quad (5.55)$$

$$\Gamma \frac{d^2 u_z}{dz^2} + i\kappa_y(\lambda + \mu) \frac{du_y}{dz} + (\rho\omega^2 - \mu\kappa_y^2) u_z = 0. \quad (5.56)$$

Este sistema de ecuaciones puede ser escrito en la forma Sturm-Liouville matricial:

$$\mathbf{B} \cdot \frac{d^2 \mathbf{F}(z)}{dz^2} + (\mathbf{P} + \mathbf{Y}) \cdot \frac{d\mathbf{F}(z)}{dz} + \mathbf{W} \cdot \mathbf{F}(z) = \mathbf{0}, \quad (5.57)$$

donde el campo  $\mathbf{F}(z)$  se conforma de las componentes del desplazamiento  $u_y(z)$  y  $u_z(z)$ :

$$\mathbf{F}(z) = \begin{bmatrix} u_y(z) \\ u_z(z) \end{bmatrix}, \quad (5.58)$$

y los coeficientes matriciales son:

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} \mu & 0 \\ 0 & \Gamma \end{pmatrix}; \quad (5.59)$$

$$\mathbf{P} = i \begin{pmatrix} 0 & \kappa_y \mu \\ \kappa_y \lambda & 0 \end{pmatrix}; \quad (5.60)$$

$$\mathbf{Y} = i \begin{pmatrix} 0 & \kappa_y \lambda \\ \kappa_y \mu & 0 \end{pmatrix}; \quad (5.61)$$

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} \Gamma q_L^2 & 0 \\ 0 & \mu q_T^2 \end{pmatrix}; \quad (5.62)$$

$$q_L = +\sqrt{\left(\frac{\omega}{v_L}\right)^2 - \kappa_y^2}; \quad v_L = \sqrt{\frac{\Gamma}{\rho}}; \quad (5.63)$$

$$q_T = +\sqrt{\left(\frac{\omega}{v_T}\right)^2 - \kappa_y^2}; \quad v_T = \sqrt{\frac{\mu}{\rho}}. \quad (5.64)$$

Aquí  $v_L$  y  $v_T$  denotan la velocidad de las ondas longitudinales y transversales respectivamente. Tratamos con un problema de ondas elásticas sagitales cuya amplitud de vibración viene dada por (5.58).

Las soluciones LI del sistema diferencial (5.57) se pueden plantear en la forma de exponenciales:

$$\mathbf{F}(z) = \begin{vmatrix} u_{0y} \\ u_{0z} \end{vmatrix} e^{ikz}, \quad (5.65)$$

y obtenemos el siguiente Problema Cuadrático de Eigenvalores (QEP):

$$(-k^2\mathbf{B} + ik(\mathbf{P} + \mathbf{Y}) + \mathbf{W}) \cdot \begin{vmatrix} u_{0y} \\ u_{0z} \end{vmatrix} = \mathbf{0}_{2 \times 1}, \quad (5.66)$$

o lo que es igual:

$$\begin{bmatrix} -k^2\mu + \Gamma q_L^2 & -k\kappa_y(\lambda + \mu) \\ -k\kappa_y(\lambda + \mu) & -k^2\Gamma + \mu q_T^2 \end{bmatrix} \cdot \begin{vmatrix} u_{0y} \\ u_{0z} \end{vmatrix} = \mathbf{0}_{2 \times 1}, \quad (5.67)$$

cuyas soluciones resultan en los eigenvalores  $k_\ell$  y las correspondientes eigenfunciones  $\mathbf{F}_\ell(z)$ . Como la matriz  $\mathbf{B}$  es *regular* ( $\text{Det}[\mathbf{B}] \neq 0$ ) tendremos un conjunto de eigenvalores  $K = \{k_\ell, \ell = 1, 2, 3, 4\}$  y las correspondientes eigenfunciones:

$$\mathbf{F}_\ell(z) = \begin{vmatrix} u_{0y,\ell} \\ u_{0z,\ell} \end{vmatrix} e^{ik_\ell z}. \quad (5.68)$$

Los eigenvalores del QEP resultan:  $k_1 = +q_L$ ,  $k_2 = -q_L$ ,  $k_3 = +q_T$ ,  $k_4 = -q_T$ .

Al igual que en la referencia [67] trabajaremos con la coordenada adimensional  $\xi = z/\bar{d}_A$ . Ello implica que las expresiones de  $q_T$  y  $q_L$  deben multiplicarse por  $\bar{d}_A$  para que los argumentos exponenciales  $ik_\ell z$  permanezcan adimensionales. Denotemos con  $q'_T$ ,  $q'_L$  y  $\kappa'_y$  las expresiones adimensionales de  $q_T$ ,  $q_L$  y  $\kappa_y$  respectivamente:

$$q'_L = +\sqrt{(\Omega_L)^2 - \kappa'_y{}^2}, \quad (5.69)$$

$$q'_T = +\sqrt{(\Omega_T)^2 - \kappa'_y{}^2}, \quad (5.70)$$

$$\kappa'_y = \kappa_y \bar{d}_A, \quad (5.71)$$

donde hemos definido las frecuencias adimensionales:  $\Omega_L = \frac{\omega \bar{d}_A}{v_L}$  y  $\Omega_T = \frac{\omega \bar{d}_A}{v_T}$ . Considerando la homogeneidad de la ESLM (5.57) y las expresiones de sus coeficientes matriciales (5.59)-(5.62), definimos los coeficientes de Lamé adimensionales:  $\mu' = \mu/(\rho_A v_{TA}^2)$ ,  $\lambda' = \lambda/(\rho_A v_{TA}^2)$  and  $\Gamma' = \Gamma/(\rho_A v_{TA}^2)$ . Como indica el subíndice, la densidad  $\rho_A$  y la velocidad transversal  $v_{TA}$  corresponden a una capa de material A. Para efectos de adimensionalizar los coeficientes de Lamé obviamente se pueden utilizar también la densidad y la velocidad transversal correspondientes a una capa de material B.

En términos de parámetros adimensionales las eigenfunciones correspondientes a  $+q'_L$ ,  $-q'_L$ ,  $+q'_T$ ,  $-q'_T$  pueden seleccionarse así:

$$\mathbf{F}_1(\xi) = \begin{vmatrix} \kappa'_y \\ q'_L \end{vmatrix} e^{iq'_L \xi} \quad ; \quad \mathbf{F}_2(\xi) = \begin{vmatrix} \kappa'_y \\ -q'_L \end{vmatrix} e^{-iq'_L \xi}, \quad (5.72)$$

$$\mathbf{F}_3(\xi) = \begin{vmatrix} -q'_T \\ \kappa'_y \end{vmatrix} e^{iq'_T \xi} \quad ; \quad \mathbf{F}_4(\xi) = \begin{vmatrix} q'_T \\ \kappa'_y \end{vmatrix} e^{-iq'_T \xi}. \quad (5.73)$$

Las formas lineales  $\mathbf{A}_\ell(\xi)$  correspondientes a cada  $\mathbf{F}_\ell(\xi)$  son:

$$\mathbf{A}_1(\xi) = i \begin{vmatrix} 2q'_L \kappa'_y \mu' \\ q'^2_L \Gamma' + \kappa'^2_y \lambda' \end{vmatrix} e^{iq'_L \xi} \quad ; \quad \mathbf{A}_2(\xi) = i \begin{vmatrix} -2q'_L \kappa'_y \mu' \\ q'^2_L \Gamma' + \kappa'^2_y \lambda' \end{vmatrix} e^{-iq'_L \xi}; \quad (5.74)$$

$$\mathbf{A}_3(\xi) = i \begin{vmatrix} -\left(q_T'^2 - \kappa_y'^2\right) \mu' \\ 2\mu' \kappa_y' q_T' \end{vmatrix} e^{iq_T'\xi} \quad ; \quad \mathbf{A}_4(\xi) = i \begin{vmatrix} -\left(q_T'^2 - \kappa_y'^2\right) \mu' \\ -2\mu' \kappa_y' q_T' \end{vmatrix} e^{-iq_T'\xi} . \quad (5.75)$$

Las componentes del desplazamiento  $u_y(\xi)$  y  $u_z(\xi)$  pueden expresarse así:

$$\mathbf{F}(\xi) = \begin{vmatrix} u_y(\xi) \\ u_z(\xi) \end{vmatrix} = a_p^+ \mathbf{F}_1(\xi) + a_p^- \mathbf{F}_2(\xi) + a_s^+ \mathbf{F}_3(\xi) + a_s^- \mathbf{F}_4(\xi), \quad (5.76)$$

donde el coeficiente  $a_p^+/a_p^-$  corresponde a la onda-P (longitudinal) que se propaga hacia la derecha/izquierda en cualquiera de los dominios de la heteroestructura y de forma análoga para la onda-S (transversal) que se propaga hacia la derecha/izquierda tenemos  $a_s^+/a_s^-$ . La forma diferencial lineal correspondiente a  $\mathbf{F}(\xi)$  resulta:

$$\mathbf{A}(\xi) = a_p^+ \mathbf{A}_1(\xi) + a_p^- \mathbf{A}_2(\xi) + a_s^+ \mathbf{A}_3(\xi) + a_s^- \mathbf{A}_4(\xi) \quad (5.77)$$

Se puede verificar que las componentes adimensionales del desplazamiento y la tensión, expresadas en la referencia [67], corresponden con las componentes de  $\mathbf{F}(\xi)$  y  $\mathbf{A}(\xi)$  respectivamente.

Como se indicó anteriormente, la heteroestructura que se analiza está compuesta de dos tipos de material (A y B) y a esto agregamos que se encuentra empalmada en sus extremos (izquierdo y derecho) a un sólido semi-infinito de material A [67]. Denotaremos con L/R al dominio externo izquierdo/derecho de la heteroestructura. Se utilizará el subíndice A/B para indicar el material con el que se trabaja.

Se considera que por el extremo izquierdo de la heteroestructura incide una onda-P bajo un ángulo  $\theta$ , entonces:

$$\kappa_y' = \kappa_{yA}' = \frac{\omega \bar{d}_A}{v_{LA}} \sin \theta = \Omega_{LA} \sin \theta. \quad (5.78)$$

Utilicemos la frecuencia adimensional  $\Omega_{LA}$  para expresar también:

$$q'_{LA} = \Omega_{LA} \cos \theta; \quad (5.79)$$

$$q'_{TA} = \Omega_{LA} \sqrt{\left(\frac{v_{LA}}{v_{TA}}\right)^2 - \sin^2 \theta}. \quad (5.80)$$

$$q'_{LB} = \Omega_{LA} \sqrt{\left(\frac{v_{LA}}{v_{LB}}\right)^2 - \sin^2 \theta}; \quad (5.81)$$

$$q'_{TB} = \Omega_{LA} \sqrt{\left(\frac{v_{LA}}{v_{TB}}\right)^2 - \sin^2 \theta}. \quad (5.82)$$

Por su parte, los coeficientes adimensionales de Lamé resultan:

$$\begin{aligned} \mu'_A = 1 \quad \Gamma'_A = v_{LA}^2/v_{TA}^2 \quad \lambda'_A = \Gamma'_A - 2\mu'_A; \\ \mu'_B = \rho_B v_{TB}^2/(\rho_A v_{TA}^2) \quad \Gamma'_B = \rho_B v_{LB}^2/(\rho_A v_{TA}^2) \quad \lambda'_B = \Gamma'_B - 2\mu'_B. \end{aligned} \quad (5.83)$$

En lo adelante para simplificar las expresiones haremos uso de las eigenfunciones (5.72)-(5.73) y de las formas lineales (5.74)-(5.75) en forma compacta:

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{\ell\alpha}(\xi) &= \mathbf{F}_{0\ell\alpha} e^{ik_{\ell\alpha} \xi}; \\ \mathbf{A}_{\ell\alpha}(\xi) &= \mathbf{A}_{0\ell\alpha} e^{ik_{\ell\alpha} \xi}; \\ \ell &= 1, 2, 3, 4. \end{aligned} \quad (5.84)$$

Aquí  $\alpha = A$  o  $\alpha = B$  según el material del medio en el que se trabaja y aplica a los parámetros que se han adimensionalizado. Definamos una base reducida en la coordenada  $\xi_0$ , es decir:

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{\ell\alpha}(\xi) &= \mathbf{F}_{0\ell\alpha} e^{ik_{\ell\alpha} (\xi - \xi_0)}; \\ \mathbf{A}_{\ell\alpha}(\xi) &= \mathbf{A}_{0\ell\alpha} e^{ik_{\ell\alpha} (\xi - \xi_0)}. \end{aligned} \quad (5.85)$$



### 5.2.3 Condiciones de contorno

De acuerdo con el planteamiento del problema, se considera que la onda incidente es longitudinal (una onda-P) e incide desde el dominio L bajo cierto ángulo  $\theta$  respecto de la normal a las intercaras de la heteroestructura, ver figura 5.8. Como resultado se tendrá onda incidente y onda reflejada en L y solo onda transmitida (saliendo de la heteroestructura) en R.

Utilizando una base reducida en  $\xi_L = z_L/\bar{d}_A$  para el dominio L tendremos que:

$$\begin{aligned}\mathbf{F}(\xi_L) &= a_p^+(\text{L}) \mathbf{F}_{01A} + a_p^-(\text{L}) \mathbf{F}_{02A} + a_s^-(\text{L}) \mathbf{F}_{04A}; \\ \mathbf{A}(\xi_L) &= a_p^+(\text{L}) \mathbf{A}_{01A} + a_p^-(\text{L}) \mathbf{A}_{02A} + a_s^-(\text{L}) \mathbf{A}_{04A}.\end{aligned}\quad (5.86)$$

Utilizando una base reducida en  $\xi_R = z_R/\bar{d}_A$  para el dominio R tendremos que:

$$\begin{aligned}\mathbf{F}(\xi_R) &= a_p^+(\text{R}) \mathbf{F}_{01A} + a_s^+(\text{R}) \mathbf{F}_{03A}; \\ \mathbf{A}(\xi_R) &= a_p^+(\text{R}) \mathbf{A}_{01A} + a_s^+(\text{R}) \mathbf{A}_{03A}.\end{aligned}\quad (5.87)$$

De (5.72) y (5.73) tenemos que:

$$\mathbf{F}_{01A} = \begin{vmatrix} \kappa'_y \\ q'_{LA} \end{vmatrix}; \quad (5.88)$$

$$\mathbf{F}_{03A} = \begin{vmatrix} -q'_{TA} \\ \kappa'_y \end{vmatrix}. \quad (5.89)$$

Luego, el coeficiente de transmisión en la dirección  $z$  para la onda longitudinal (onda-P) vendrá dado por:

$$t_{cpz} = \frac{a_p^+(\text{R})}{a_p^+(\text{L})}, \quad (5.90)$$

y el coeficiente de transmisión en la dirección  $z$  para la onda transversal (onda-S):

$$t_{csz} = \frac{a_s^+(\text{R})}{a_p^+(\text{L})} \frac{\kappa'_y}{q'_{LA}} = \frac{a_s^+(\text{R})}{a_p^+(\text{L})} \tan \theta. \quad (5.91)$$

Las respectivas transmitancias serán:  $|t_{cpz}|^2$  y  $|t_{csz}|^2$ . Llamaremos transmitancia total en la dirección  $z$  a la suma  $|t_{cpz}|^2 + |t_{csz}|^2$ .

En lo adelante se utilizarán bases de soluciones LI reducidas para que las matrices de trabajo resulten en términos del espesor adimensional de las capas,  $\zeta_A = d_A/\bar{d}_A$  para las capas de material A y  $\zeta_B = d_B/\bar{d}_A$  para las capas de material B. De (5.49) tenemos que:  $\zeta_A = 1 + \sqrt{3\delta}(2t - 1)$ . Esta expresión para  $\zeta_A$  fue establecida en [67] al igual que el valor  $\zeta_B = 0.5$ .

### 5.2.4 Cálculo de la transmitancia en términos de la matrix de transferencia asociada $\mathbf{T}$ ( $4 \times 4$ )

Llamemos  $\mathbf{T}_\alpha$  a la matrix  $\mathbf{T}$  que relaciona el campo  $\mathbf{F}(\xi)$  y la forma diferencial lineal  $\mathbf{A}(\xi)$  en los extremos de una capa de material  $\alpha = A/B$ . Para determinarla utilizaremos la expresión (3.7) que permite determinar la matrix  $\mathbf{T}$  en un dominio donde se conoce una base de soluciones LI. Para este caso tendremos:

$$\mathbf{T}_\alpha = \mathbf{Q}_\alpha(\xi) \cdot \mathbf{Q}_\alpha(\xi_0)^{-1}; \quad (5.92)$$

$$\begin{vmatrix} \mathbf{F}(\xi) \\ \mathbf{A}(\xi) \end{vmatrix} = \mathbf{T}_\alpha \cdot \begin{vmatrix} \mathbf{F}(\xi_0) \\ \mathbf{A}(\xi_0) \end{vmatrix}. \quad (5.93)$$

Considérese que  $\xi_0$  es la coordenada del extremo izquierdo de la capa y que  $\xi = \xi_0 + \zeta_\alpha$ , donde  $\zeta_\alpha$  es el espesor de la capa de material  $\alpha = A/B$ . Utilizando una base de soluciones LI reducida en  $\xi_0$  (5.85) en (5.92) tendremos que:

$$\mathbf{T}_\alpha = \begin{pmatrix} \mathbf{F}_{01\alpha} e^{iq'_{L\alpha} \zeta_\alpha} & \mathbf{F}_{02\alpha} e^{-iq'_{L\alpha} \zeta_\alpha} & \mathbf{F}_{03\alpha} e^{iq'_{T\alpha} \zeta_\alpha} & \mathbf{F}_{04\alpha} e^{-iq'_{T\alpha} \zeta_\alpha} \\ \mathbf{A}_{01\alpha} e^{iq'_{L\alpha} \zeta_\alpha} & \mathbf{A}_{02\alpha} e^{-iq'_{L\alpha} \zeta_\alpha} & \mathbf{A}_{03\alpha} e^{iq'_{T\alpha} \zeta_\alpha} & \mathbf{A}_{04\alpha} e^{-iq'_{T\alpha} \zeta_\alpha} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{F}_{01\alpha} & \mathbf{F}_{02\alpha} & \mathbf{F}_{03\alpha} & \mathbf{F}_{04\alpha} \\ \mathbf{A}_{01\alpha} & \mathbf{A}_{02\alpha} & \mathbf{A}_{03\alpha} & \mathbf{A}_{04\alpha} \end{pmatrix}^{-1}. \quad (5.94)$$

La primera matriz de este producto se puede descomponer así:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{F}_{01\alpha} & \mathbf{F}_{02\alpha} & \mathbf{F}_{03\alpha} & \mathbf{F}_{04\alpha} \\ \mathbf{A}_{01\alpha} & \mathbf{A}_{02\alpha} & \mathbf{A}_{03\alpha} & \mathbf{A}_{04\alpha} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} e^{iq'_{L\alpha} \zeta_\alpha} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-iq'_{L\alpha} \zeta_\alpha} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{iq'_{T\alpha} \zeta_\alpha} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-iq'_{T\alpha} \zeta_\alpha} \end{pmatrix}, \quad (5.95)$$

de manera que se puede comprobar directamente que  $\text{Det}[\mathbf{T}_\alpha] = 1$ .

Sea  $\mathbf{T}(\xi_R, \xi_L)$  la matriz que relaciona el campo y la forma diferencial lineal en los extremos de la heteroestructura en estudio:

$$\begin{vmatrix} \mathbf{F}(\xi_R) \\ \mathbf{A}(\xi_R) \end{vmatrix} = \mathbf{T}(\xi_R, \xi_L) \cdot \begin{vmatrix} \mathbf{F}(\xi_L) \\ \mathbf{A}(\xi_L) \end{vmatrix}, \quad (5.96)$$

dicha matriz se calculó utilizando la regla de composición correspondiente (3.13). Comenzando por el extremo izquierdo de la figura 5.8 para la primera celda unitaria (cu) de la heteroestructura tendremos que:

$$\mathbf{T}_{cu} = \mathbf{T}_B \cdot \mathbf{T}_A, \quad (5.97)$$

luego para dos celdas unitarias tendremos que:

$$\mathbf{T}_{2cu} = \mathbf{T}_{cu} \cdot \mathbf{T}_{cu}, \quad (5.98)$$

para tres celdas unitarias:

$$\mathbf{T}_{3cu} = \mathbf{T}_{cu} \cdot \mathbf{T}_{2cu}, \quad (5.99)$$

y así sucesivamente, entonces si la heteroestructura se compone de  $m$  celdas unitarias tendremos:

$$\mathbf{T}(\xi_R, \xi_L) = \mathbf{T}_{cu} \cdot \mathbf{T}_{(m-1)cu}. \quad (5.100)$$

Sustituyendo (5.86) y (5.87) en (5.96) después de un poco de algebra sencilla se obtiene que:

$$\begin{vmatrix} a_p^-(L)/a_p^+(L) \\ a_s^-(L)/a_p^+(L) \\ a_p^+(R)/a_p^+(L) \\ a_s^+(R)/a_p^+(L) \end{vmatrix} = [\mathbf{M}_1 - \mathbf{T}(\xi_R, \xi_L) \cdot \mathbf{M}_2]^{-1} \cdot \mathbf{T}(\xi_R, \xi_L) \cdot \begin{vmatrix} \mathbf{F}_{01A} \\ \mathbf{A}_{01A} \end{vmatrix}, \quad (5.101)$$

donde:

$$\mathbf{M}_1 = \begin{pmatrix} \mathbf{0}_{2 \times 1} & \mathbf{0}_{2 \times 1} & \mathbf{F}_{01A} & \mathbf{F}_{03A} \\ \mathbf{0}_{2 \times 1} & \mathbf{0}_{2 \times 1} & \mathbf{A}_{01A} & \mathbf{A}_{03A} \end{pmatrix}; \quad (5.102)$$

$$\mathbf{M}_2 = \begin{pmatrix} \mathbf{F}_{02A} & \mathbf{F}_{04A} & \mathbf{0}_{2 \times 1} & \mathbf{0}_{2 \times 1} \\ \mathbf{A}_{02A} & \mathbf{A}_{04A} & \mathbf{0}_{2 \times 1} & \mathbf{0}_{2 \times 1} \end{pmatrix}. \quad (5.103)$$

De la ecuación anterior se obtiene  $a_p^+(R)/a_p^+(L)$  y  $a_s^+(R)/a_p^+(L)$  y con ellas se calculan los coeficientes de transmisión dados por (5.90) y (5.91) y a partir de estos las transmitancias correspondientes.

### 5.2.5 Cálculo de la transmitancia en términos de la matrix híbrida $\mathbf{H}$ ( $4 \times 4$ )

Llamemos  $\mathbf{H}_\alpha$  a la matrix  $\mathbf{H}$  que relaciona el campo  $\mathbf{F}(\xi)$  y la forma diferencial lineal  $\mathbf{A}(\xi)$  en los extremos de una capa de material  $\alpha = A/B$ . Para determinarla utilizaremos la expresión (3.34) que permite determinar la matrix  $\mathbf{H}$  en un dominio donde se conoce una base de soluciones LI. Para este caso tendremos:

$$\mathbf{H}_\alpha = U^{FA}(\xi, \xi_0) \cdot [U^{AF}(\xi, \xi_0)]^{-1}; \quad (5.104)$$

$$\begin{vmatrix} \mathbf{F}(\xi_0) \\ \mathbf{A}(\xi) \end{vmatrix} = \mathbf{H}_\alpha \cdot \begin{vmatrix} \mathbf{A}(\xi_0) \\ \mathbf{F}(\xi) \end{vmatrix}. \quad (5.105)$$

Considérese que  $\xi_0$  es la coordenada del extremo izquierdo de la capa y que  $\xi = \xi_0 + \zeta_\alpha$ , donde  $\zeta_\alpha$  es el espesor de la capa de material  $\alpha = A/B$ . Utilizando una base de soluciones LI reducida en  $\xi_0$  (5.85) en (5.104) tendremos que:

$$\mathbf{H}_\alpha = \begin{pmatrix} \mathbf{F}_{01\alpha} & \mathbf{F}_{02\alpha} & \mathbf{F}_{03\alpha} & \mathbf{F}_{04\alpha} \\ \mathbf{A}_{01\alpha} e^{iq'_{L\alpha} \zeta_\alpha} & \mathbf{A}_{02\alpha} e^{-iq'_{L\alpha} \zeta_\alpha} & \mathbf{A}_{03\alpha} e^{iq'_{T\alpha} \zeta_\alpha} & \mathbf{A}_{04\alpha} e^{-iq'_{T\alpha} \zeta_\alpha} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{01\alpha} & \mathbf{A}_{02\alpha} & \mathbf{A}_{03\alpha} & \mathbf{A}_{04\alpha} \\ \mathbf{F}_{01\alpha} e^{iq'_{L\alpha} \zeta_\alpha} & \mathbf{F}_{02\alpha} e^{-iq'_{L\alpha} \zeta_\alpha} & \mathbf{F}_{03\alpha} e^{iq'_{T\alpha} \zeta_\alpha} & \mathbf{F}_{04\alpha} e^{-iq'_{T\alpha} \zeta_\alpha} \end{pmatrix}^{-1}. \quad (5.106)$$

Sea  $\mathbf{H}(\xi_R, \xi_L)$  la matrix que relaciona el campo y la forma diferencial lineal en los extremos de la heteroestructura en estudio:

$$\begin{vmatrix} \mathbf{F}(\xi_L) \\ \mathbf{A}(\xi_R) \end{vmatrix} = \mathbf{H}(\xi_R, \xi_L) \cdot \begin{vmatrix} \mathbf{A}(\xi_L) \\ \mathbf{F}(\xi_R) \end{vmatrix}, \quad (5.107)$$

dicha matrix se calculó utilizando la regla de composición correspondiente (3.60). Comenzando por el extremo izquierdo de la figura 5.8 para la primera celda unitaria (cu) de la heteroestructura tendremos que:

$$\mathbf{H}_{cu} = \mathbf{H}_B \otimes \mathbf{H}_A, \quad (5.108)$$

luego para dos celdas unitarias tendremos que:

$$\mathbf{H}_{2cu} = \mathbf{H}_{cu} \otimes \mathbf{H}_{cu}, \quad (5.109)$$

para tres celdas unitarias:

$$\mathbf{H}_{3cu} = \mathbf{H}_{cu} \otimes \mathbf{H}_{2cu}, \quad (5.110)$$

y así sucesivamente, entonces si la heteroestructura se compone de  $m$  celdas unitarias tendremos:

$$\mathbf{H}(\xi_R, \xi_L) = \mathbf{H}_{cu} \otimes \mathbf{H}_{(m-1)cu}. \quad (5.111)$$

Sustituyendo (5.86) y (5.87) en (5.107), después de un poco de algebra sencilla se obtiene que:

$$\begin{vmatrix} a_p^-(L)/a_p^+(L) \\ a_s^-(L)/a_p^+(L) \\ a_p^+(R)/a_p^+(L) \\ a_s^+(R)/a_p^+(L) \end{vmatrix} = [\mathbf{M}_1 - \mathbf{H}(\xi_R, \xi_L) \cdot \mathbf{M}_2]^{-1} \cdot \left\{ \mathbf{H}(\xi_R, \xi_L) \cdot \begin{vmatrix} \mathbf{A}_{01A} \\ \mathbf{0}_{2 \times 1} \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} \mathbf{F}_{01A} \\ \mathbf{0}_{2 \times 1} \end{vmatrix} \right\}, \quad (5.112)$$

donde:

$$\mathbf{M}_1 = \begin{pmatrix} \mathbf{F}_{02A} & \mathbf{F}_{04A} & \mathbf{0}_{2 \times 1} & \mathbf{0}_{2 \times 1} \\ \mathbf{0}_{2 \times 1} & \mathbf{0}_{2 \times 1} & \mathbf{A}_{01A} & \mathbf{A}_{03A} \end{pmatrix}; \quad (5.113)$$

$$\mathbf{M}_2 = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{02A} & \mathbf{A}_{04A} & \mathbf{0}_{2 \times 1} & \mathbf{0}_{2 \times 1} \\ \mathbf{0}_{2 \times 1} & \mathbf{0}_{2 \times 1} & \mathbf{F}_{01A} & \mathbf{F}_{03A} \end{pmatrix}. \quad (5.114)$$

De la ecuación anterior se obtiene  $a_p^+(R)/a_p^+(L)$  y  $a_s^+(R)/a_p^+(L)$  y con ellas se calculan los coeficientes de transmisión dados por (5.90) y (5.91) y a partir de estos las transmitancias correspondientes.

### 5.2.6 Cálculo de la transmitancia en términos de una matrix de dispersión $\mathbf{S}$ ( $4 \times 4$ )

Para el cálculo de la matrix de dispersión se hizo uso de la expresión (3.50) que relaciona a esta matrix con la matrix híbrida. Para este problema determinamos primero la matrix de dispersión que relaciona coeficientes a ambos lados de una capa B y que denotamos  $\mathbf{S}(A; A)$ . Para ello consideramos el conjunto de capas A-B-A donde de acuerdo con la expresión (3.50) el dominio interno M es ahora una capa de material B, y por ende el dominio L/R es la capa de material A a su izquierda/derecha.

Como primer paso se aplicó la expresión (5.106) a la capa de material B:

$$\mathbf{H}_B = \begin{pmatrix} \mathbf{F}_{01B} & \mathbf{F}_{02B} & \mathbf{F}_{03B} & \mathbf{F}_{04B} \\ \mathbf{A}_{01B} e^{iq'_{LB} \zeta_B} & \mathbf{A}_{02B} e^{-iq'_{LB} \zeta_B} & \mathbf{A}_{03B} e^{iq'_{TB} \zeta_B} & \mathbf{A}_{04B} e^{-iq'_{TB} \zeta_B} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{01B} & \mathbf{A}_{02B} & \mathbf{A}_{03B} & \mathbf{A}_{04B} \\ \mathbf{F}_{01B} e^{iq'_{LB} \zeta_B} & \mathbf{F}_{02B} e^{-iq'_{LB} \zeta_B} & \mathbf{F}_{03B} e^{iq'_{TB} \zeta_B} & \mathbf{F}_{04B} e^{-iq'_{TB} \zeta_B} \end{pmatrix}^{-1}. \quad (5.115)$$

Las matrices  $\mathbf{Q}(L : z_L)$  y  $\mathbf{Q}(R : z_R)$  cuyas particiones intervienen en (3.50) se construyeron utilizando una base reducida en la coordenada izquierda de las capas de material A, resultando:

$$\mathbf{Q}(L : z_L) = \begin{pmatrix} \mathbf{F}_{01A} e^{iq'_{LA} \zeta_A} & \mathbf{F}_{03A} e^{iq'_{TA} \zeta_A} & \mathbf{F}_{02A} e^{-iq'_{LA} \zeta_A} & \mathbf{F}_{04A} e^{-iq'_{TA} \zeta_A} \\ \mathbf{A}_{01A} e^{iq'_{LA} \zeta_A} & \mathbf{A}_{03A} e^{iq'_{TA} \zeta_A} & \mathbf{A}_{02A} e^{-iq'_{LA} \zeta_A} & \mathbf{A}_{04A} e^{-iq'_{TA} \zeta_A} \end{pmatrix}; \quad (5.116)$$

$$\mathbf{Q}(R : z_R) = \begin{pmatrix} \mathbf{F}_{01A} & \mathbf{F}_{03A} & \mathbf{F}_{02A} & \mathbf{F}_{04A} \\ \mathbf{A}_{01A} & \mathbf{A}_{03A} & \mathbf{A}_{02A} & \mathbf{A}_{04A} \end{pmatrix}. \quad (5.117)$$

Las expresiones (5.115)-(5.117) fueron sustituidas en (3.50) para obtener la matrix de dispersión  $\mathbf{S}(A; A)$ .

Consideremos toda la heteroestructura de manera que ahora el dominio interno M contiene todas las capas de esta y  $\mathbf{S}(R; L)$  es la matrix de dispersión que relaciona los coeficientes en el dominio externo R con los coeficientes en el dominio externo L:

$$\begin{vmatrix} a_p^-(L) \\ a_s^-(L) \\ a_p^+(R) \\ a_s^+(R) \end{vmatrix} = \mathbf{S}(R; L) \cdot \begin{vmatrix} a_p^+(L) \\ a_s^+(L) \\ a_p^-(R) \\ a_s^-(R) \end{vmatrix}. \quad (5.118)$$

Esta matrix se calculó a partir de la matrix  $\mathbf{S}(A; A)$  aplicando la regla de composición correspondiente (3.67). Comenzando por el extremo izquierdo de la figura 5.8. Para un sistema de dos celdas unitarias tendremos que:

$$\mathbf{S}(R; L) = \mathbf{S}(A; A)_2 = \mathbf{S}(A; A) \otimes \mathbf{S}(A; A), \quad (5.119)$$

para un sistema de tres celdas unitarias:

$$\mathbf{S}(R; L) = \mathbf{S}(A; A)_3 = \mathbf{S}(A; A) \otimes \mathbf{S}(A; A)_2, \quad (5.120)$$

y así sucesivamente, entonces si la heteroestructura se compone de  $m$  celdas unitarias tendremos:

$$\mathbf{S}(R; L) = \mathbf{S}(A; A) \otimes \mathbf{S}(A; A)_{m-1}. \quad (5.121)$$

De acuerdo con las condiciones de contorno establecidas, los coeficientes  $a_s^+(L)$ ,  $a_p^-(R)$  y  $a_s^-(R)$  son nulos. Sustituyendo estos valores en (5.118) tenemos que:

$$\frac{a_p^+(R)}{a_p^+(L)} = \mathbf{S}(R; L)_{31}; \quad (5.122)$$

$$\frac{a_s^+(R)}{a_p^+(L)} = \mathbf{S}(R; L)_{41}. \quad (5.123)$$

Con este resultado calculamos los coeficientes de transmisión de nuestro interés, expresados en (5.90) y (5.91). Aquí y en lo adelante, con  $\mathbf{S}(\mathbf{R};\mathbf{L})_{ij}$  denotamos el elemento matricial de fila  $i$  y columna  $j$  en la matriz  $\mathbf{S}(\mathbf{R};\mathbf{L})$ .

### 5.2.7 Resultado de los cálculos numéricos

El sistema estudiado consta de  $m = 18$  celdas unitarias (36 capas) y los datos de este vienen dados en [67]. Los parámetros elásticos y las velocidades de fase utilizadas en el cálculo son:  $\rho_A = 11.4 \times 10^3$  kg/m<sup>3</sup>,  $\rho_B = 1.2 \times 10^3$  kg/m<sup>3</sup>,  $v_{LA} = 2160$  m/s,  $v_{LB} = 2830$  m/s,  $v_{TA} = 860$  m/s,  $v_{TB} = 1160$  m/s, respectivamente. Como se comentó anteriormente el espesor de las capas que conforman la celda unitaria está normalizado:  $\zeta_A = 1 + \sqrt{3}\delta(2t - 1)$  y  $\zeta_B = 0.5$ . En nuestros cálculos consideraremos un cristal fonónico perfectamente periódico u ordenado ( $\delta = 0$ ) y un cristal fonónico desordenado con  $\delta = 0.05$ .

#### Obtención de bandas prohibidas de ondas elásticas

Para verificar la validez de nuestras matrices se consideraron dos situaciones: 1) La propagación de una onda P y una onda S a través de un cristal fonónico ordenado a incidencia normal ( $\theta = 0$ ) y 2) Una onda P que incide bajo un ángulo  $\theta = 40^\circ$  en un sistema ordenado ( $\delta = 0.0$ ) y en un sistema desordenado ( $\delta = 0.05$ ). Para ambas situaciones determinamos los intervalos de bandas prohibidas con ayuda del factor de localización ( $N$ -ésimo exponente de Lyapunov) [69, 70]. Este parámetro ha sido utilizado para caracterizar la estructura de bandas tanto en cristales fonónicos ordenados como en cristales fonónicos desordenados (incluyendo los cuasiperiódicos) [67, 70, 71, 72]. Nuestros resultados fueron comparados con los reportados en [67].

Las expresiones para el cálculo del factor de localización en términos de la matriz  $\mathbf{T}$  y en términos de la matriz de dispersión  $\mathbf{S}$  se encuentran en el apéndice N.

La figura 5.9 muestra el comportamiento del factor de localización (FL) en función de la frecuencia adimensional  $\Omega_{LA} = \frac{\omega d_A}{v_{LA}}$  para una onda P y para una onda S que se propaga en la dirección normal a las intercaras del sistema a capas. En este caso, para calcular el FL se utilizaron las expresiones (N.9) y (N.5) en términos de la matriz  $\mathbf{T}$  y la matriz  $\mathbf{S}$ , respectivamente. Debido a que el número de celdas unitarias (o iteraciones) debe ser suficientemente grande para obtener valores estables del FL, se utilizaron  $m = 10000$  iteraciones en la ecuación (N.9) y  $m = 200$  en (N.5). Como se observa en la figura 5.9 el FL obtenido por ambos algoritmos es idéntico.

De acuerdo con la definición del Factor de localización, si su valor es cero, los correspondiente intervalos de frecuencia son conocidos como bandas de paso (passbands, en *inglés*); por otra parte, si su valor es positivo, los intervalos son bandas prohibidas (band gaps, en *inglés*). Los intervalos de bandas prohibidas obtenidos (en la fig.5.9) fueron comparados con los reportados en [67] como resultado de utilizar una matriz  $\mathbf{T}$ . Comparando se tiene que (nuestro intervalo)/(banda prohibida reportada): (1.125, 2.970)/(1.11, 2.986) para la onda P y, (0.458, 1.185)/(0.45, 1.21), (1.395, 2.303)/(1.35, 2.30), (2.543, 3.098)/(2.51, 3.11) y (3.480, 3.735)/(3.48, 3.76) para la onda S. Ambos conjuntos de bandas prohibidas concuerdan muy bien.

La figura 5.10 muestra el FL para una onda P que incide bajo un ángulo  $\theta = 40^\circ$  en cristales fonónicos ordenados y desordenados. En este caso ( $N = 2$ ) se utilizaron las ecuaciones (N.8) y (N.5) para calcular el FL en términos de la matriz  $\mathbf{T}$  y la matriz  $\mathbf{S}$ , respectivamente. Se consideraron los mismos valores de  $m$  que en el caso de incidencia normal. Como se puede apreciar, los valores del FL obtenidos mediante ambos algoritmos para el sistema ordenado son idénticos y predicen los mismos intervalos de bandas prohibidas.

El espectro de transmitancia para un cristal fonónico ordenado ( $\delta = 0.0$ ) compuesto de  $m = 18$  celdas unitarias se presenta en la figura 5.11 para una onda tipo P que incide bajo el ángulo  $\theta = 40^\circ$ . Este espectro fue calculado utilizando la matriz híbrida  $\mathbf{H}$ , la matriz de dispersión  $\mathbf{S}$  y el método de la matriz Global, este último involucra una matriz de orden  $144 \times 148$  construida siguiendo el procedimiento descrito

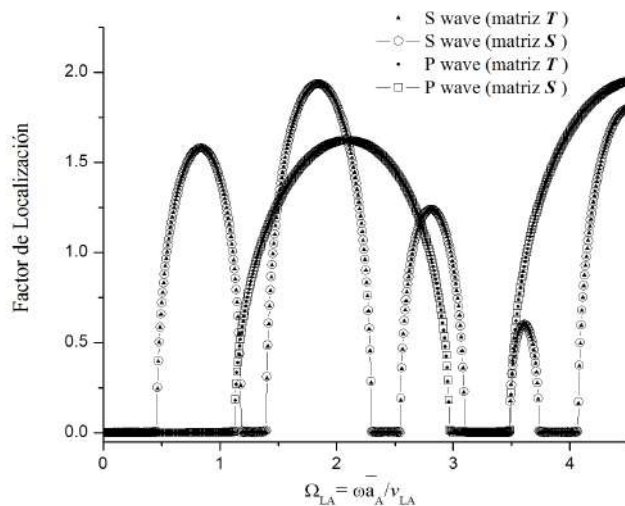


Figura 5.9: Factor de localización de ondas P y S que se propagan en la dirección normal en un cristal fonónico ordenado.

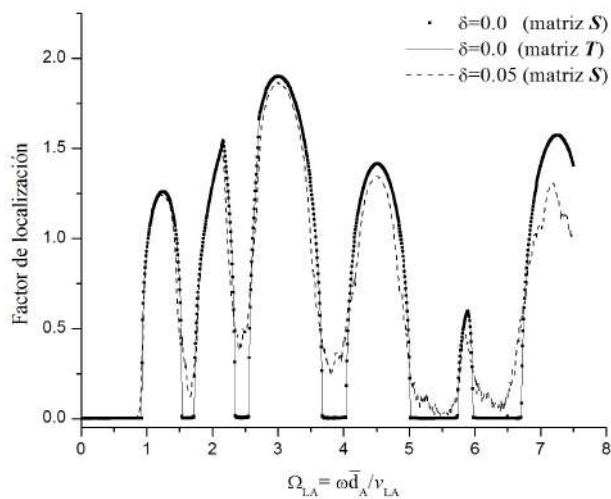


Figura 5.10: Factor de localización de una onda P que incide bajo un ángulo de  $40^\circ$  en un cristal fonónico ordenado ( $\delta = 0.0$ ) y en uno desordenado ( $\delta = 0.05$ ). El cálculo fue realizado utilizando la matriz de dispersión  $\mathbf{S}$  y la matriz de transferencia asociada  $\mathbf{T}$ .

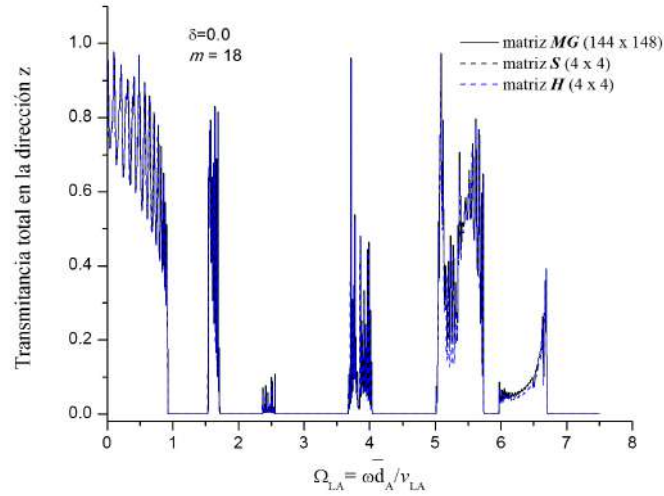


Figura 5.11: Coincidencia de los espectros de transmitancia calculados utilizando la matriz híbrida ( $\mathbf{H}$ ), la matriz de dispersión ( $\mathbf{S}$ ) y una matriz Global ( $\mathbf{MG}$ ). Sistema ordenado compuesto de  $m = 18$  celdas unitarias. La onda P incide bajo un ángulo  $\theta = 40^\circ$ .

en [8]. Se verificó que las bandas prohibidas predichas por estos tres métodos coinciden y que la figura 5.11 predice las mismas bandas prohibidas que el factor de localización en la figura 5.10 para el sistema ordenado.

Para el cristal fonónico desordenado ( $\delta = 0.05$ ), las bandas prohibidas predichas en las figuras 5.10 y 5.12 también responden al mismo patrón. Además, se puede verificar que la figura 5.10 es la misma que la figura 9 de la referencia [67], donde el Factor de localización fue calculado para el mismo caso, utilizando la matriz  $\mathbf{T}$ .

### Análisis de la estabilidad numérica de la matriz $\mathbf{T}$ .

En esta sección se mostrará como la inestabilidad numérica de la matriz  $\mathbf{T}$  afecta las curvas de transmitancia calculadas a partir de esta matriz. Como consecuencia los intervalos de bandas prohibidas mostrados por estas curvas pueden no coincidir con los predichos por el Factor de localización.

### Comportamiento de la estabilidad numérica de la matriz $\mathbf{T}$ con el incremento del número de capas del cristal fonónico.

Considérese una onda P que incide bajo un ángulo  $\theta = 40^\circ$  en un cristal fonónico ordenado. Bajo este ángulo de incidencia los eigenvalores del QEP  $\pm q_L$  y  $\pm q_T$  son reales. La figura 5.13 muestra que para el sistema compuesto por 10 celdas unitarias ( $m = 10$ ) el determinante de  $\mathbf{T}$  es igual o muy próximo a 1 (no hay degradación numérica) y los valores de transmitancia calculados a partir de las matrices  $\mathbf{S}$ ,  $\mathbf{H}$  y  $\mathbf{T}$  coinciden.

Sin embargo, si se incrementa el número de capas a 36 ( $m = 18$  celdas unitarias) se obtiene que, para algunos intervalos de frecuencia, el espectro de transmitancia calculado a partir de la matriz  $\mathbf{T}$  difiere significativamente del obtenido a partir de las matrices  $\mathbf{S}$  y  $\mathbf{H}$ , como se muestra en la figura 5.14. Este comportamiento, caracterizado por valores inaceptables de transmitancia, es consecuencia de la degradación numérica (problema  $\Omega - d$ ) de la matriz  $\mathbf{T}$ . En este caso el determinante de  $\mathbf{T}$  alcanza valores del orden de  $10^{24}$ .

Nótese que en este caso la inestabilidad numérica de la matriz  $\mathbf{T}$  no se debe al incremento de la frecuencia

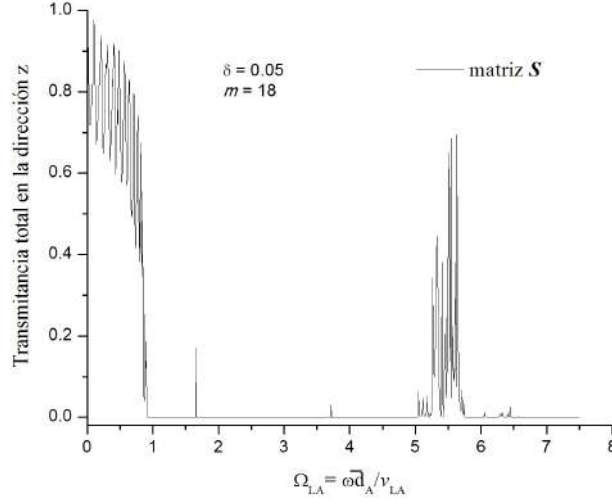


Figura 5.12: Espectro de transmitancia de una onda P que incide bajo un ángulo  $\theta = 40^\circ$  en un cristal fonónico desordenado ( $m = 18$ ), calculado utilizando la matriz de dispersión ( $\mathbf{S}$ ).

adimensional  $\Omega_{LA} = \frac{\omega \bar{d}_A}{v_{LA}}$  como suele suceder cuando los eigenvalores del QEP son complejos. Si los eigenvalores son reales se puede comprobar, sustituyendo en (5.94) las expresiones correspondientes, que los elementos de  $\mathbf{T}_\alpha$  se componen de sumas algebraicas que contienen dos funciones trigonométricas del conjunto:  $\cos(q'_{L\alpha}\zeta_\alpha)$ ,  $\sin(q'_{L\alpha}\zeta_\alpha)$ ,  $\cos(q'_{T\alpha}\zeta_\alpha)$  y  $\sin(q'_{T\alpha}\zeta_\alpha)$ , por ejemplo:

$$\mathbf{T}_{\alpha 11} = \frac{\kappa'_y \cos(q'_{L\alpha}\zeta_\alpha) n_\alpha + \cos(q'_{T\alpha}\zeta_\alpha) h_\alpha q'_{T\alpha}}{\kappa'_y n_\alpha + h_\alpha q'_{T\alpha}}, \quad \mathbf{T}_{\alpha 12} = \frac{i [\kappa'_y \sin(q'_{L\alpha}\zeta_\alpha) m_\alpha - \sin(q'_{T\alpha}\zeta_\alpha) g_\alpha q'_{T\alpha}]}{\kappa'_y g_\alpha + m_\alpha q'_{L\alpha}}.$$

$$\begin{aligned} g &= 2q'_L \kappa'_y \mu' & h &= q'_L{}^2 \Gamma' + \kappa'_y{}^2 \lambda'; \\ n &= 2q'_T \kappa'_y \mu' & m &= (q'_T{}^2 - \kappa'_y{}^2) \mu'. \end{aligned} \quad (5.124)$$

En este caso, hay valores de frecuencia para los cuales los elementos de la matriz  $\mathbf{T}(z_R, z_L)$  de toda la heteroestructura, resultante del producto de las matrices de sus subceldas, crecen significativamente a medida que crece el número de matrices involucradas en el producto. Así, para tales frecuencias, los errores de redondeo se acumulan con el incremento del número de subceldas y el problema  $\Omega - d$  se manifiesta. Algunos intervalos de bandas prohibidas mostrados en el espectro de transmitancias calculado a partir de  $\mathbf{T}$  (en la figura 5.14) no coinciden con los predichos por el factor de localización en la figura 5.10.

### Comportamiento de la estabilidad numérica de la matriz $\mathbf{T}$ con el incremento de la frecuencia y el ángulo de incidencia

El comportamiento típico de la inestabilidad numérica de  $\mathbf{T}$  se muestra en la figura 5.15, la cual corresponde a la transmitancia de una onda P incidente bajo un ángulo  $\theta = 70^\circ$  y que se propaga a través del cristal fonónico ordenado con  $m = 10$ , antes analizado para  $\theta = 40^\circ$ . Para  $\theta = 70^\circ$  los eigenvalores del QEP,  $\pm q_{LB}$  son imaginarios puros y en los elementos de  $\mathbf{T}$  aparecen sumas de exponenciales crecientes y decrecientes cuyo valor neto crece exponencialmente con el incremento de la frecuencia. Por tanto, para ángulos relativamente grandes ( $\theta \geq 50^\circ$ ) la acumulación de los errores de redondeo se ve favorecida por



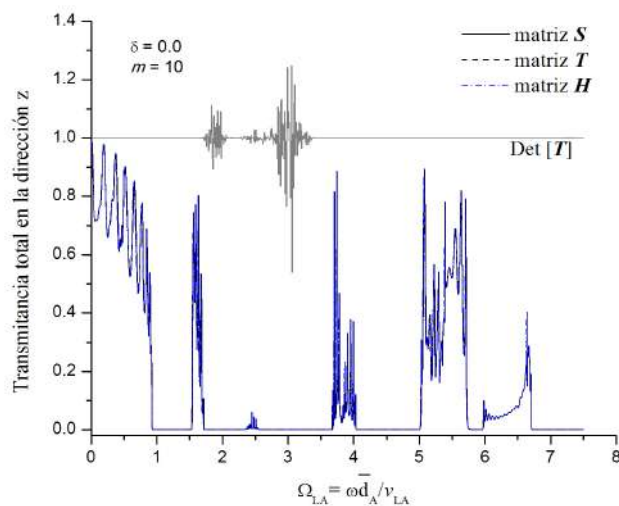


Figura 5.13: Espectro de transmitancia de una onda P que incide bajo un ángulo  $\theta = 40^\circ$  en un cristal fonónico ordenado con  $m = 10$ , calculado utilizando tres matrices: la matriz de dispersión (**S**), la matriz de transferencia asociada (**T**) y la matriz híbrida **H**. Se incluye el determinante de **T**.

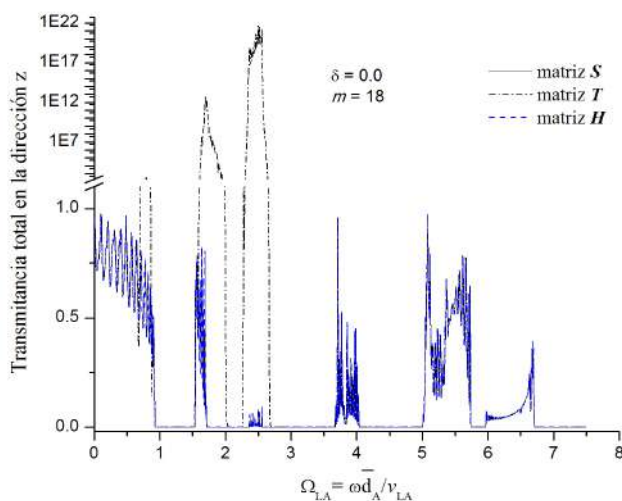


Figura 5.14: Espectro de transmitancia de una onda P que incide bajo un ángulo  $\theta = 40^\circ$  en un cristal fonónico ordenado con  $m = 18$ , calculado utilizando tres matrices: la matriz de dispersión (**S**), la matriz de transferencia asociada (**T**) y la matriz híbrida **H**. La degradación numérica de la matriz (**T**) se manifiesta en algunos intervalos de frecuencia.

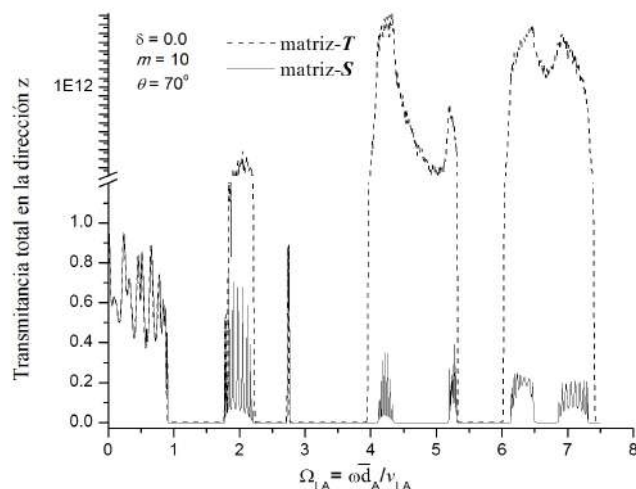


Figura 5.15: Espectro de transmitancia de una onda P que incide bajo un ángulo  $\theta = 70^\circ$  en un cristal fonónico ordenado con  $m = 10$ , calculado utilizando la matriz de dispersión ( $\mathbf{S}$ ) y la matriz de transferencia asociada ( $\mathbf{T}$ ). Se observa la usual degradación numérica de la matriz ( $\mathbf{T}$ ).

el incremento de la frecuencia y la manifestación del problema  $\Omega - d$  resulta más probable. En este caso, el determinante de  $\mathbf{T}$  alcanza valores del orden de  $10^{14}$ .

Recordamos que la matriz  $\mathbf{T}$  es única para una ESLM dada (en este caso la ecuación que describe la propagación de una onda elástica sagital en un medio isotrópico y homogéneo) de manera que cualquier matriz de transferencia  $\mathbf{T}$  derivada de la misma ecuación de movimiento puede ser vulnerable al problema  $\Omega - d$  tanto para eigenvalores reales como para eigenvalores complejos como se muestra en la figura 5.14 y en la figura 5.15 respectivamente. Consideramos que esta degradación numérica también puede estar presente en la figura 8 de la referencia [67] donde también se estudia la propagación de la onda elástica sagital en los mismos cristales fonónicos y se reportan coeficientes de transmisión con valores superiores a 1.

Nótese que la inestabilidad numérica de la matrix  $\mathbf{T}$  afecta el cálculo de los espectros de transmitancia en los sistemas compuestos por 18 celdas unitarias. Sin embargo esto no sucede en el cálculo del Factor de localización como muestran las figuras 5.9 y 5.10 donde se consideran 10000 celdas unitarias. Consideramos que esto se debe al proceso de orthonormalización de los vectores de estado, aplicado después de cada iteración en el algoritmo de Wolf. Como se explica en [70], la orthonormalización previene que la norma de los vectores crezca indefinidamente y permite que los resultados del cálculo converjan a un valor asintótico. De esta forma se previene la acumulación de errores de redondeo en cada iteración y se logra evadir el problema  $\Omega - d$ .

## 5.3 Cristales fotónicos de Silicio poroso: Dispersión de ondas electromagnéticas

### 5.3.1 Introducción

Los cristales fotónicos son arreglos periódicos de materiales dieléctricos que tienen bandas fotónicas prohibidas similares a las bandas electrónicas de los cristales sólidos [73]. Se ha demostrado que el Silicio poroso es un excelente material para fabricar cristales fotónicos tales como espejos de Bragg dieléctricos y

microcavidades Fabry-Pérot, entre otros [74, 75, 76, 77]. En esta sección se realizan cálculos de reflectancia para dos cristales fotónicos en base a Silicio poroso: una microcavidad Fabry-Pérot y un espejo fotónico de Silicio poroso (EFSP); en ambos casos se considerarán las pérdidas por conductividad.

Para abordar dichos sistemas primeramente se obtuvo la Ecuación Sturm-Liouville Matricial para el caso de un sistema anisotrópico lineal a capas en el que se consideran las pérdidas por conductividad. Estos resultados permitieron calcular el espectro de reflectancia en la microcavidad Fabry-Pérot y verificar la validez de nuestra formulación al comprobar la correspondencia entre los resultados del cálculo y mediciones experimentales reportadas [78]. Con el EFSP (sistema isotrópico) se verificaron predicciones teóricas y se pudo mostrar la inestabilidad numérica (problema  $\Omega - d$ ) que manifiesta la matriz de transferencia asociada a bajas longitudes de onda donde la absorción del Silicio poroso es fuerte. En presencia de dicha degradación numérica se muestra la diferencia en los espectros obtenidos a partir de la matriz híbrida (numéricamente estable) y la matriz  $\mathbf{T}$ .

### 5.3.2 Ecuación Sturm-Liouville Matricial. Propagación de OEM en sistemas anisotrópicos lineales multicapas

En esta sección se obtiene la ESLM para un sistema anisotrópico lineal a capas, el caso del medio isotrópico será un caso particular de este.

Considérese un sistema anisotrópico lineal a capas. La linealidad significa que se trabajará con las relaciones constitutivas:  $\vec{D} = \hat{\epsilon}(\vec{r}) \cdot \vec{E}$ ,  $\vec{H} = \hat{\nu}(\vec{r}) \cdot \vec{B}$  y  $\vec{j} = \hat{\sigma}(\vec{r}) \cdot \vec{E}$ . Los vectores  $\vec{E}$  and  $\vec{H}$  son la intensidad del campo eléctrico y magnético respectivamente,  $\vec{D}$  es el desplazamiento eléctrico,  $\vec{B}$  la densidad de flujo magnético y  $\vec{j}$  el vector densidad de corriente eléctrica. El tensor permitividad se denotó mediante  $\hat{\epsilon}$  y  $\hat{\nu}$  representa el inverso del tensor permeabilidad magnética  $\hat{\mu}$ . Por su parte  $\hat{\sigma}$  denota el tensor conductividad eléctrica.

Se asume que las heteroestructuras tienen geometría planar. Entonces los tensores dependientes de la posición  $\hat{\epsilon}$ ,  $\hat{\nu}$  y  $\hat{\sigma}$  (que además son simétricos) dependerán solamente de la coordenada  $z$  y las componentes de los vectores  $\vec{E}$ ,  $\vec{B}$  and  $\vec{H}$  pueden ser expresadas en la forma:

$$E_m(\vec{r}, t) = - \left( \frac{\partial \psi_0}{\partial x_m} + \frac{\partial \psi_m}{\partial t} \right) = E_m(z) e^{i(\kappa_1 x + \kappa_2 y - \omega t)}, \quad (5.125)$$

$$B_m(\vec{r}, t) = \sum_j \sum_n e_{mjn} \frac{\partial \psi_n}{\partial x_j} = B_m(z) e^{i(\kappa_1 x + \kappa_2 y - \omega t)}, \quad (5.126)$$

$$H_m(\vec{r}, t) = \sum_j \sum_s \sum_n \hat{\nu}_{mj} e_{jsn} \frac{\partial \psi_n}{\partial x_s} = H_m(z) e^{i(\kappa_1 x + \kappa_2 y - \omega t)}, \quad (5.127)$$

donde

$$\psi_\eta = \psi_\eta(z) e^{i(\kappa_1 x + \kappa_2 y - \omega t)}; \quad \eta = 0, 1, 2, 3. \quad (5.128)$$

Aquí  $\psi_0$  es el potencial escalar,  $\vec{\psi} = (\psi_1, \psi_2, \psi_3)$  es el potencial vector y  $\omega$  es la frecuencia. Aquí y en lo adelante los subíndices  $(s, j, m, n)$  toman valores de 1 a 3 y las coordenadas  $x_1, x_2, x_3$  representan las coordenadas  $x, y, z$  respectivamente. Se ha utilizado un símbolo Levi-Cevita  $e_{mjn}$  para expresar el producto vectorial en (5.126) y (5.127).

Con ayuda de las expresiones (5.125)-(5.128) podemos escribir la ley de Ampère en la forma de ecuaciones diferenciales parciales escalares:

$$\sum_j \sum_m e_{njm} \frac{\partial H_m(\vec{r}, t)}{\partial x_j} + i\omega \sum_m \tilde{\epsilon}_{nm} E_m(\vec{r}, t) = 0; \quad n = 1, 2, 3, \quad (5.129)$$

donde el elemento tensorial  $\tilde{\epsilon}_{nm} = \hat{\epsilon}_{nm} + i \frac{\hat{\sigma}_{nm}}{\omega}$  y generalmente se le llama permitividad compleja. Por medio las relaciones (5.125) y (5.127) el sistema de ecuaciones (5.129) puede ser expresado solamente

en términos de las componentes del campo eléctrico. Además, dicho sistema puede ser reducido a dos ecuaciones, por ejemplo en términos de las componentes transversales  $E_1$  and  $E_2$ . Para esto se determinó la componente  $E_3$  a partir de la tercera ecuación ( $n = 3$ ) en (5.129) en la forma (apéndice O):

$$E_3(z) = -i \frac{dE_1(z)}{dz} \frac{C_2}{C_1} - i \frac{dE_2(z)}{dz} \frac{C_3}{C_1} - E_1(z) \frac{C_4}{C_1} - E_2(z) \frac{C_5}{C_1}, \quad (5.130)$$

y se sustituyó  $E_3(z)$  en las ecuaciones dadas para  $n = 1, 2$ . Después de un trabajo algebraico largo pero sencillo, el sistema de ecuaciones (5.129) puede ser transformado en un sistema Sturm-Liouville Matricial para las incógnitas  $E_1$  and  $E_2$ :

$$\frac{d}{dz} \left[ B_{\gamma\eta} \frac{dE_\eta(z)}{dz} + P_{\gamma\eta} E_\eta(z) \right] + Y_{\gamma\eta} \frac{dE_\eta(z)}{dz} + W_{\gamma\eta} E_\eta(z) = \mathbf{0}; \quad \gamma, \eta = 1, 2, \quad (5.131)$$

con los coeficientes matriciales:

$$\mathbf{B}(z) = \begin{bmatrix} \left( \frac{C_2^2}{C_1} - \hat{\nu}_{22} \right) & \left( \frac{C_2 C_3}{C_1} + \hat{\nu}_{12} \right) \\ \left( \frac{C_2 C_3}{C_1} + \hat{\nu}_{12} \right) & \left( \frac{C_3^2}{C_1} - \hat{\nu}_{11} \right) \end{bmatrix}; \quad (5.132)$$

$$\mathbf{P}(z) = \begin{bmatrix} i \left( \hat{\nu}_{23} \kappa_2 - \frac{C_2 C_4}{C_1} \right) & -i \left( \hat{\nu}_{23} \kappa_1 + \frac{C_2 C_5}{C_1} \right) \\ -i \left( \hat{\nu}_{13} \kappa_2 + \frac{C_3 C_4}{C_1} \right) & i \left( \hat{\nu}_{13} \kappa_1 - \frac{C_3 C_5}{C_1} \right) \end{bmatrix}; \quad (5.133)$$

$$\mathbf{Y}(z) = \begin{bmatrix} i \left( \hat{\nu}_{23} \kappa_2 - \frac{C_2 C_4}{C_1} \right) & -i \left( \hat{\nu}_{13} \kappa_2 + \frac{C_3 C_4}{C_1} \right) \\ -i \left( \hat{\nu}_{23} \kappa_1 + \frac{C_2 C_5}{C_1} \right) & i \left( \hat{\nu}_{13} \kappa_1 - \frac{C_3 C_5}{C_1} \right) \end{bmatrix}; \quad (5.134)$$

$$\mathbf{W}(z) = \begin{bmatrix} \left( C_7 - \frac{C_4^2}{C_1} \right) & - \left( C_6 + \frac{C_5 C_4}{C_1} \right) \\ - \left( C_6 + \frac{C_5 C_4}{C_1} \right) & \left( C_8 - \frac{C_5^2}{C_1} \right) \end{bmatrix}. \quad (5.135)$$

Las componentes del campo magnético  $\vec{H}$  en términos de las componentes  $E_1$  y  $E_2$  y las expresiones para los parámetros  $C_1$  a  $C_9$  vienen dadas en el apéndice O.

Para una capa homogénea las soluciones LI del sistema de ecuaciones diferenciales (5.131) pueden ser expresadas por medio de exponenciales [36], [37]:

$$\vec{E}_T(z) = \begin{vmatrix} E_{01} \\ E_{02} \end{vmatrix} e^{ikz}, \quad (5.136)$$

y obtenemos el siguiente problema cuadrático de eigenvalores (QEP):

$$\left( -k^2 \mathbf{B} + ik(\mathbf{P} + \mathbf{Y}) + \mathbf{W} \right) \cdot \begin{vmatrix} E_{01} \\ E_{02} \end{vmatrix} = \mathbf{0}_{2 \times 1}, \quad (5.137)$$

cuyas soluciones resultan en los eigenvalores  $k_\ell$  y las correspondientes eigenfunciones  $\vec{E}_{T\ell}(z)$ . Si la matriz  $\mathbf{B}$  es *regular* ( $\text{Det}[\mathbf{B}] \neq 0$ ) tenemos un conjunto de eigenvalores  $K = \{k_\ell, \ell = 1, 2, 3, 4\}$  y sus correspondientes eigenfunciones:

$$\vec{E}_{T\ell}(z) = \begin{vmatrix} E_{01,\ell} \\ E_{02,\ell} \end{vmatrix} e^{ik_\ell z}. \quad (5.138)$$

Por otra parte, dado que  $\mathbf{B}$  es hermítica,  $\mathbf{P} + \mathbf{Y}$  es antihermítica y  $\mathbf{W}$  es hermítica, se cumple la hermiticidad formal del operador Sturm-Liouville matricial  $\mathbf{L}$  y los eigenvalores cumplen la propiedad general: pueden ser reales o formar pares del tipo  $(k_\ell; k_\ell^*)$ .

Finalmente, el campo eléctrico transversal  $\vec{E}_T(z)$ , solución de la ecuación (5.131) puede ser expresado mediante la combinación lineal:

$$\vec{E}_T(z) = \begin{vmatrix} E_1(z) \\ E_2(z) \end{vmatrix} = \sum_{\ell=1}^4 a_\ell \vec{E}_{T\ell}(z), \quad (5.139)$$

donde  $a_1, a_2, a_3, a_4$  es un conjunto de coeficientes de expansión.

Como sabemos la forma lineal asociada al operador diferencial  $\mathbf{L}(z)$  es continua para todo  $z$  a lo largo de la heteroestructura. En (5.131) la forma diferencial lineal se expresa como:

$$A_\gamma(z) = B_{\gamma\eta} \frac{dE_\eta(z)}{dz} + P_{\gamma\eta} E_\eta(z); \quad \gamma, \eta = 1, 2, \quad (5.140)$$

y su cálculo conduce a  $A_1(z) = -i\omega H_2(z)$  y  $A_2(z) = i\omega H_1(z)$  lo que significa continuidad de las componentes tangenciales del campo magnético.

Nótese que para un medio anisotrópico no conductor  $\hat{\sigma} = \mathbf{0}$  los parámetros  $C_1, C_4, C_5, C_6, C_7$  and  $C_8$  (apéndice O) son reales asumiendo que los tensores  $\hat{\epsilon}$  y  $\hat{\mu}$  son reales. Entonces el análisis de las matrices dadas por las expresiones (5.132)-(5.135) indica que se cumplen las condiciones de hermiticidad formal del operador  $\mathbf{L}(z)$  y por tanto el módulo del determinante de la matriz de transferencia asociada  $|\text{Det}[\mathbf{T}]| = 1$  en virtud del análisis realizado en la sección 3.1.2. Como en este caso los eigenvalores pueden ser complejos la matriz  $\mathbf{T}$  resulta más vulnerable a la inestabilidad numérica (Problema  $\Omega - d$ ) y se recomienda supervisar la precisión de los cálculos numéricos. Por otra parte si  $\hat{\sigma} \neq \mathbf{0}$  entonces se puede comprobar que las condiciones de hermiticidad formal de  $\mathbf{L}(z)$  no se cumplen y el determinante de  $\mathbf{T}$  puede ser diferente de 1. En este caso debemos esperar atenuación de la OEM en la dirección  $z$  debido a la conductividad eléctrica del medio, lo que significa que el eigenvalor  $k_\ell$  debe ser complejo de acuerdo con la expresión (5.138). Por tanto para el medio conductor también se recomienda supervisar la calidad de los cálculos numéricos aunque teniendo en cuenta que en este caso por lo general  $\text{Det}[\mathbf{T}] \neq 1$ .

### 5.3.3 Propagación de OEM en sistemas isotrópicos lineales multicapas

A partir de la ESLM (5.131) se derivan las ecuaciones de movimiento para la propagación de OEM en un sistema isotrópico lineal a capas. En este caso los tensores  $\hat{\epsilon} = \epsilon(z)\mathbf{I}$ ,  $\hat{\nu} = \frac{1}{\mu(z)}\mathbf{I}$  y  $\hat{\sigma} = \sigma(z)\mathbf{I}$  siendo  $\mathbf{I}$  la matriz identidad de orden  $3 \times 3$ . El vector de onda  $\vec{\kappa} = (\kappa_1, \kappa_2)$  puede ser seleccionado como  $\vec{\kappa} = (0, \kappa)$ . Bajo estas condiciones, las ecuaciones involucradas en (5.131) se desacoplan y resultan:

$$\frac{d}{dz} \left[ \frac{1}{\mu(z)} \frac{dE_1(z)}{dz} \right] + E_1(z) \left[ \omega^2 \tilde{\epsilon}(z) - \frac{\kappa^2}{\mu(z)} \right] = 0; \quad (5.141)$$

$$\frac{d}{dz} \left[ \left( \frac{\omega^2 \tilde{\epsilon}(z)}{\kappa^2 - \omega^2 \tilde{\epsilon}(z) \mu(z)} \right) \frac{dE_2(z)}{dz} \right] - \omega^2 \tilde{\epsilon}(z) E_2 = 0, \quad (5.142)$$

donde  $\tilde{\epsilon}(z) = \epsilon(z) + i \frac{\sigma(z)}{\omega}$ . Las ecuaciones (5.141) y (5.142) pueden ser tratadas como dos ESLM independientes, por tanto de cada una de ellas podemos obtener una matriz de transferencia asociada  $\mathbf{T}$  de orden  $2 \times 2$ . Es fácil comprobar que para ninguna de las dos ecuaciones se cumplen las condiciones de hermiticidad formal del operador  $\mathbf{L}$ , sin embargo  $\mathbf{P} = \mathbf{Y} = 0$  y por tanto la matriz  $\mathbf{D}(z) = 0$  (sección 3.1.2) y como resultado  $\text{Det}[\mathbf{T}] = 1$ .

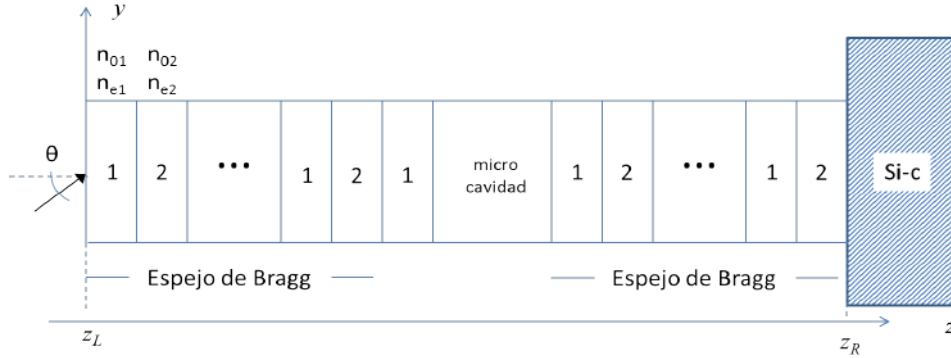


Figura 5.16: Esquema general de una microcavidad Fabry-Pérot. Se indican los espejos de Bragg, sus pares de capas alternas y la microcavidad. La heteroestructura está acoplada por la derecha a un sustrato de Silicio cristalino (Si-c).

## 5.4 Microcavidad Fabry-Pérot

Con el objetivo de verificar las ecuaciones ESLM obtenidas y las matrices que de ellas pueden derivar aplicamos nuestros resultados a una heteroestructura tipo microcavidad Fabry-Pérot analizada experimentalmente en [78]. Este es un caso sencillo de sistema anisotrópico a capas construido en base a Silicio mesoporoso que presenta birrefringencia óptica como consecuencia de una simetría uniaxial inducida en el plano cristalográfico (110) [79]. La heteroestructura que se analiza consiste de dos espejos de Bragg separados por una capa o microcavidad de espesor óptico  $\lambda_0/2$  ( $\lambda_0$  es la longitud de onda central del espectro de radiación de los espejos de Bragg). La figura 5.16 muestra un esquema de la heteroestructura. Cada espejo está compuesto por 12 pares de capas alternas de Silicio mesoporoso con diferente índice de refracción y espesor óptico igual a  $\lambda_0/4$ . Los índices de refracción ordinario  $n_0$  y extraordinario  $n_e$  de las capas alternas son  $n_{01} = 1.58$ ,  $n_{e1} = 1.50$  y  $n_{02} = 1.39$ ,  $n_{e2} = 1.32$ . La microcavidad es una capa con índices  $n_{02} = 1.39$  y  $n_{e2} = 1.32$ . De acuerdo con [78]  $\lambda_0 = 850$  nm y la anisotropía de los índices de refracción fue determinada a la longitud de onda  $\lambda = 800$  nm.

En este problema podemos seleccionar el eje  $z$  en la dirección del eje óptico del Silicio mesoporoso que compone las capas. Entonces cada capa (homogénea) se caracteriza por un tensor permitividad dado por:

$$\tilde{\epsilon} = \frac{1}{c^2} \begin{pmatrix} (n_0 + i\xi_0)^2 & 0 & 0 \\ 0 & (n_0 + i\xi_0)^2 & 0 \\ 0 & 0 & (n_e + i\xi_e)^2 \end{pmatrix}, \quad (5.143)$$

donde  $\xi$  denota el coeficiente de extinción y  $c$  la velocidad de la luz en el vacío; aquí se ha considerado  $\mu = 1$ . Se considera que la OEM incide desde el aire entonces las componentes del vector de onda  $\kappa$  serán:

$$\kappa_x = \frac{\omega}{c} n_a \sin \theta \sin \varphi \quad (5.144)$$

$$\kappa_y = \frac{\omega}{c} n_a \sin \theta \cos \varphi, \quad (5.145)$$

donde  $n_a$  es el índice de refracción del aire. El ángulo de incidencia  $\theta$  es medido con respecto al eje  $z$  y el ángulo azimutal  $\varphi$  con respecto al eje  $y$ . Para  $\varphi = 0$  la componente  $E_1$  del campo eléctrico es la onda s-polarizada y la componente  $E_2$  la onda p-polarizada. Bajo estas condiciones y utilizando (5.143) las ecuaciones involucradas en (5.131) se desacoplan y resultan:

$$\frac{d^2 E_1(z)}{dz^2} + \frac{\omega^2}{c^2} [(n_0 + i\xi_0)^2 - (n_a \sin \theta)^2] E_1(z) = 0; \quad (5.146)$$

$$\frac{d^2 E_2(z)}{dz^2} + \frac{\omega^2}{c^2} \frac{(n_0 + i\xi_0)^2}{(n_e + i\xi_e)^2} [(n_e + i\xi_e)^2 - (n_a \sin \theta)^2] E_2(z) = 0. \quad (5.147)$$

Para ambas ecuaciones los eigenvalores son  $k_1 = +k$ ,  $k_2 = -k$ ; con  $k = \frac{\omega}{c} \sqrt{(n_0 + i\xi_0)^2 - (n_a \sin \theta)^2}$  para la ecuación (5.146) y  $k = \frac{\omega}{c} \left( \frac{n_0 + i\xi_0}{n_e + i\xi_e} \right) \sqrt{(n_e + i\xi_e)^2 - (n_a \sin \theta)^2}$  para la ecuación (5.147). Para ambas ecuaciones las eigenfunciones del QEP pueden expresarse así:  $e^{ikz}$ ,  $e^{-ikz}$  ( $E_{01,1} = 1$ ;  $E_{01,2} = 1$ ).

Para el desarrollo que sigue nos enfocaremos en la componente transversal  $E_1$  (para la componente  $E_2$  el procedimiento es el mismo). Teniendo en cuenta (5.139) y las eigenfunciones expresamos:

$$E_1(z) = a_1 e^{ikz} + a_2 e^{-ikz}, \quad (5.148)$$

y la forma diferencial lineal correspondiente será:

$$A_1(z) = ik [a_1 e^{ikz} - a_2 e^{-ikz}]. \quad (5.149)$$

### 5.4.1 Condiciones de contorno

Considérese que la heteroestructura que se estudia es la región intermedia M del modelo L – M – R donde el dominio externo L es aire y el dominio externo R es un sustrato de Silicio cristalino. Se considera que la OEM incide desde el aire y se tendrá una onda reflejada mientras que en el sustrato de Silicio cristalino solo tendremos la onda transmitida, entonces para estos dominios podemos escribir:

$$\begin{aligned} E_1(\text{L} : z) &= a_1(\text{L}) e^{ik_a z} + a_2(\text{L}) e^{-ik_a z} \\ A_1(\text{L} : z) &= ik_a [a_1(\text{L}) e^{ik_a z} - a_2(\text{L}) e^{-ik_a z}], \end{aligned} \quad (5.150)$$

mientras que:

$$\begin{aligned} E_1(\text{R} : z) &= a_1(\text{R}) e^{ik_{cr} z} \\ A_1(\text{R} : z) &= ik_{cr} a_1(\text{R}) e^{ik_{cr} z}. \end{aligned} \quad (5.151)$$

El subíndice  $a/cr$  indica que  $k$  es evaluado considerando que el medio es aire/Silicio cristalino.

### 5.4.2 Cálculo de reflectancia en términos de la matriz $\mathbf{T}$ ( $2 \times 2$ )

Partiendo de la expresión que determina la matriz  $\mathbf{T}$  en un dominio homogéneo (3.7) y considerando las eigenfunciones  $e^{ikz}$ ;  $e^{-ikz}$ , para una capa tendremos que:

$$\mathbf{T}(d) = \begin{pmatrix} \cos kd & \frac{1}{k} \sin kd \\ -k \sin kd & \cos kd \end{pmatrix}, \quad (5.152)$$

donde  $d = z - z_0$ . Definamos por conveniencia la magnitud  $f(k) = \frac{c}{\omega} k$ , entonces la forma diferencial lineal (5.149) resulta:

$$A_1(z) = i \frac{\omega}{c} f(k) [a_1 e^{ikz} - a_2 e^{-ikz}]. \quad (5.153)$$

Sustituyendo esta expresión en la relación:

$$\begin{vmatrix} E_1(z) \\ A_1(z) \end{vmatrix} = \mathbf{T}(d) \cdot \begin{vmatrix} E_1(z_0) \\ A_1(z_0) \end{vmatrix}, \quad (5.154)$$

podemos reacomodar términos y trabajar con  $\mathcal{A}_1(z) = -i \frac{c}{\omega} A_1(z)$  en lugar de  $A_1(z)$  y con la matriz de capa:

$$\mathbf{T}(d) = \begin{pmatrix} \cos kd & \frac{i}{f(k)} \sin kd \\ i f(k) \sin kd & \cos kd \end{pmatrix}, \quad (5.155)$$

con  $d = \frac{\lambda_0}{4n_0}$  para las capas de los espejos y  $d = \frac{\lambda_0}{2n_0}$  para la microcavidad. Aquí  $n_0$  representa el índice de refracción ordinario de la capa debido a que las componentes  $E_1$  y  $E_2$  son perpendiculares al eje óptico del Silicio mesoporoso que compone las capas.

Sea  $\mathbf{T}(z_R, z_L)$  la matriz que relaciona el campo y la forma diferencial lineal en los extremos de la heteroestructura en estudio:

$$\begin{vmatrix} E_1(\mathbf{R} : z_R) \\ \mathcal{A}_1(\mathbf{R} : z_R) \end{vmatrix} = \mathbf{T}(z_R, z_L) \cdot \begin{vmatrix} E_1(\mathbf{L} : z_L) \\ \mathcal{A}_1(\mathbf{L} : z_L) \end{vmatrix}, \quad (5.156)$$

dicha matriz se calculó utilizando la regla de composición correspondiente (3.13). Comenzando por el extremo izquierdo de la figura 5.16 para el primer par de capas de la heteroestructura tendremos que:

$$\mathbf{T}_p = \mathbf{T}_2(d) \cdot \mathbf{T}_1(d), \quad (5.157)$$

donde  $\mathbf{T}_1(d)/\mathbf{T}_2(d)$  es la matriz (5.155) correspondiente a la capa 1/2 del par. Luego para dos pares de capas tendremos que:

$$\mathbf{T}_{2p} = \mathbf{T}_p \cdot \mathbf{T}_p, \quad (5.158)$$

para tres pares de capas:

$$\mathbf{T}_{3p} = \mathbf{T}_p \cdot \mathbf{T}_{2p}, \quad (5.159)$$

y así sucesivamente. Entonces para un espejo de  $m$  pares de capas tendremos:

$$\mathbf{T}_{Es} = \mathbf{T}_p \cdot \mathbf{T}_{(m-1)p}. \quad (5.160)$$

Para la heteroestructura analizada, ver el esquema de la figura 5.16, la matriz  $\mathbf{T}(z_R, z_L)$  se calculó de la manera siguiente:

$$\mathbf{T}(z_R, z_L) = \mathbf{T}_{Es} \cdot \mathbf{T}_{mc} \cdot \mathbf{T}_1(d) \cdot \mathbf{T}_{Es}, \quad (5.161)$$

donde  $\mathbf{T}_{Es}$  es la matriz correspondiente a un espejo y  $\mathbf{T}_{mc}$  es la matriz correspondiente a la capa que constituye la microcavida.

A partir de (5.156) podemos calcular el coeficiente de reflexión  $r_c = a_2(\mathbf{L})/a_1(\mathbf{L})$  y de transmisión  $t_c = a_1(\mathbf{R})/a_1(\mathbf{L})$ . Para el problema que nos ocupa nos interesa el cálculo de la reflectancia  $R_c = |r_c|^2$ . Para esto conviene expresar el campo y la forma lineal dados en (5.150) y (5.151) en términos de una base de eigenfunciones reducida en  $z_L/z_R$  respectivamente. De esta forma tendremos que:

$$\begin{aligned} E_1(\mathbf{L} : z_L) &= a_1(\mathbf{L}) + a_2(\mathbf{L}) \\ \mathcal{A}_1(\mathbf{L} : z_L) &= f(k_a) [a_1(\mathbf{L}) - a_2(\mathbf{L})]; \end{aligned} \quad (5.162)$$

$$\begin{aligned} E_1(\mathbf{R} : z_R) &= a_1(\mathbf{R}) \\ \mathcal{A}_1(\mathbf{R} : z_R) &= f(k_{cr}) a_1(\mathbf{R}). \end{aligned} \quad (5.163)$$

Sustituyendo estas expresiones en (5.156), después de un poco de álgebra sencilla se obtiene:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} r_c \\ t_c \end{pmatrix} &= \left[ \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & \sqrt{n_{cr}^2 - (n_a \sin \theta)^2} \end{pmatrix} - \mathbf{T}(z_R, z_L) \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -n_a \cos \theta & 0 \end{pmatrix} \right]^{-1} \\ &\cdot \mathbf{T}(z_R, z_L) \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ n_a \cos \theta \end{pmatrix}; \end{aligned} \quad (5.164)$$

donde  $n_a/n_{cr}$  es el índice de refracción del aire/Silicio cristalino; el Silicio cristalino y el aire han sido considerados medios isotrópicos y se ha despreciado la absorción en ellos. Por tanto:  $f(k_{cr}) = \sqrt{n_{cr}^2 - (n_a \sin \theta)^2}$  y  $f(k_a) = n_a \cos \theta$ .

### 5.4.3 Cálculo de reflectancia en términos de la matriz $\mathbf{H}$ ( $2 \times 2$ )

En este caso la matriz híbrida  $\mathbf{H}$  de la capa se obtuvo a partir de (5.155) haciendo uso de la relación entre la matriz híbrida y la matriz de transferencia asociada (3.39):

$$\mathbf{H}(d) = \begin{pmatrix} -i \frac{1}{f(k)} \tan kd & \frac{1}{\cos kd} \\ \frac{1}{\cos kd} & i f(k) \tan kd \end{pmatrix}. \quad (5.165)$$



Sea  $\mathbf{H}(z_R, z_L)$  la matriz híbrida que relaciona el campo y la forma diferencial lineal en los extremos de la heteroestructura en estudio:

$$\begin{vmatrix} E_1(\text{L} : z_L) \\ \mathcal{A}_1(\text{R} : z_R) \end{vmatrix} = \mathbf{H}(z_R, z_L) \cdot \begin{vmatrix} \mathcal{A}_1(\text{L} : z_L) \\ E_1(\text{L} : z_R) \end{vmatrix}, \quad (5.166)$$

dicha matriz se calculó utilizando la regla de composición correspondiente expresada en (3.60). Comenzando por el extremo izquierdo de la figura 5.16 para el primer par de capas de la heteroestructura tendremos que:

$$\mathbf{H}_p = \mathbf{H}_2(d) \otimes \mathbf{H}_1(d), \quad (5.167)$$

donde  $\mathbf{H}_1(d)/\mathbf{H}_2(d)$  es la matriz de capa (5.165) correspondiente a la capa 1/2 del par. El símbolo  $\otimes$  representa la regla de composición antes mencionada. Luego para dos pares de capas tendremos que:

$$\mathbf{H}_{2p} = \mathbf{H}_p \otimes \mathbf{H}_p, \quad (5.168)$$

para tres pares de capas:

$$\mathbf{H}_{3p} = \mathbf{H}_p \otimes \mathbf{H}_{2p}, \quad (5.169)$$

y así sucesivamente. Entonces para un espejo de  $m$  pares de capas tendremos:

$$\mathbf{H}_{Es} = \mathbf{H}_p \otimes \mathbf{H}_{(m-1)p}. \quad (5.170)$$

Para la heteroestructura representada en el esquema de la figura 5.16 tendremos que:

$$\mathbf{H}(z_R, z_L) = \mathbf{H}_{Es} \otimes \left\{ \mathbf{H}_{mc} \otimes \left\{ \mathbf{H}_1(d) \otimes \mathbf{H}_{Es} \right\} \right\}, \quad (5.171)$$

donde  $\mathbf{H}_{Es}$  es la matriz híbrida correspondiente a un espejo de Bragg y  $\mathbf{H}_{mc}$  es la matriz híbrida correspondiente a la capa que constituye la microcavidad. Procediendo de forma análoga a como se procedió con la matriz  $\mathbf{T}(z_R, z_L)$ , a partir de (5.166) tendremos que:

$$\begin{pmatrix} r_c \\ t_c \end{pmatrix} = \left[ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{n_{cr}^2 - (n_a \sin \theta)^2} \end{pmatrix} - \mathbf{H}(z_R, z_L) \cdot \begin{pmatrix} -n_a \cos \theta & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right]^{-1} \cdot \left[ \mathbf{H}(z_R, z_L) \cdot \begin{pmatrix} n_a \cos \theta \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right]. \quad (5.172)$$

#### 5.4.4 Resultado de cálculos numéricos

La reflectancia fue calculada para las componentes  $E_1$  y  $E_2$  del campo eléctrico en términos de la matriz de transferencia asociada utilizando la expresión (5.164) a un ángulo de incidencia  $\theta = 20^\circ$  y ángulo azimutal  $\varphi = 0^\circ$ . Para simplificar el cálculo se consideraron constantes el índice de refracción y el coeficiente de extinción en todo el intervalo de longitudes de onda analizado y asumimos  $\xi_0 = \xi_e = 0.004$ . La figura 5.17 muestra el espectro de reflectancia obtenido para la onda s-polarizada ( $E_1$ ) y para la onda p-polarizada ( $E_2$ ). Para ambas se observa un modo de microcavidad. Para la onda s-polarizada este modo se obtuvo a la longitud de onda  $\lambda_{mc} = 827$  nm en correspondencia con el espectro experimental [78] para el que  $\lambda_{mc} = 830$  nm. Al igual que el espectro experimental también se observa un cambio en la posición de  $\lambda_{mc}$  al pasar de una polarización a la otra indicándose un incremento en dicho cambio con el aumento del ángulo de incidencia de la onda p-polarizada. Para  $\theta = 25^\circ$  este cambio se calculó en alrededor de 17 nm con respecto a la onda s-polarizada a  $\theta = 20^\circ$ . Para el intervalo de longitudes de onda analizado  $\text{Det} [\mathbf{T}(z_R, z_L)] = 1$  como se predice analíticamente para  $\mathbf{P} = \mathbf{Y} = \mathbf{0}$ . Para verificar los valores de reflectancia obtenidos con la matriz híbrida, se calculó el espectro para la onda s-polarizada ( $E_1$ ) a un ángulo de incidencia  $\theta = 20^\circ$  y ángulo azimutal  $\varphi = 0^\circ$ . Como puede comprobarse en la figura 5.18 el espectro calculado con la matriz híbrida coincide con el calculado con la matriz de transferencia asociada.

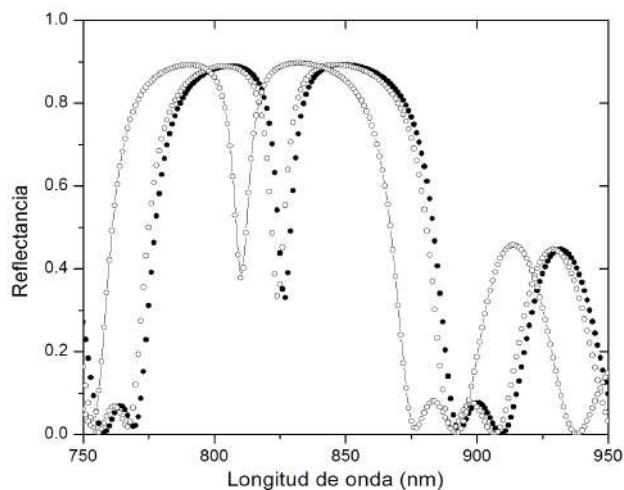


Figura 5.17: Espectro de reflectancia de una microcavidad Fabry-Pérot calculado a un ángulo de incidencia  $\theta = 20^\circ$  para la componente eléctrica  $E_1$  (círculos cerrados) y para  $E_2$  (círculos abiertos), y a  $\theta = 25^\circ$  para la componente  $E_2$  (línea + círculos abiertos). El ángulo azimutal  $\varphi = 0^\circ$ .

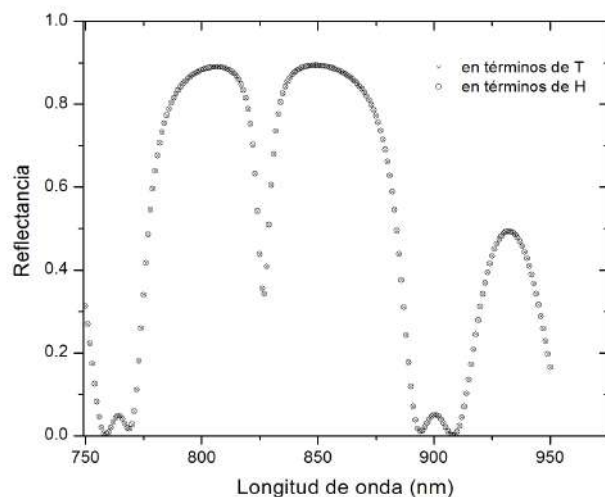


Figura 5.18: Espectro de reflectancia de una microcavidad Fabry-Pérot calculado a un ángulo de incidencia  $\theta = 20^\circ$  para la componente eléctrica  $E_1$  en términos de la matriz de transferencia asociada  $\mathbf{T}$  y en términos de la matriz híbrida. El ángulo azimutal  $\varphi = 0^\circ$ .

## 5.5 Espejo fotónico de Silicio poroso

En esta sección aplicamos nuestros resultados a un hetroestructura tipo espejo fotónico de Silicio poroso (EFSP) como ejemplo de sistema isotrópico a capas. Los EFSPs son multicapas que alternan dos índices de refracción, digamos  $n_{01}$  y  $n_{02}$ , en las que se impone la condición  $\lambda_0/4$  al espesor óptico de las capas. El modelo de EFSP que analizamos está compuesto de 20 subespejos y se basa en las estructuras de este tipo analizadas en [80]. Cada subespejo alterna 10 capas de Silicio poroso con índices de refracción  $n_{01} = 2.0$  y  $n_{02} = 1.5$ . Para reflejar un intervalo continuo de longitudes de ondas desde 250 nm hasta 1500 nm se seleccionó la longitud de onda central  $\lambda_{01} = 250$  nm para el primer subespejo y  $\lambda_{020} = 1500$  nm para el espejo 20. La diferencia en la longitud de onda  $\lambda_0$  de dos subespejos consecutivos es de 50 nm para los primeros 16 subespejos y de 100 nm para los restantes cuatro subespejos. El objetivo es calcular los espectros de reflectancia en términos de la matriz  $\mathbf{T}$  y la matriz  $\mathbf{H}$  y analizar la estabilidad numérica de la matriz  $\mathbf{T}$  en presencia de absorción.

Consideremos homogéneas las capas de la heteroestructura que analizamos y que  $\mu = 1$  para el Silicio poroso. Bajo estas condiciones tendremos la misma ecuación en (5.141) y (5.142) para las componentes  $E_1$  y  $E_2$ . Nos enfocaremos en la ecuación para la componente  $E_1$ . Asumiendo incidencia normal tendremos que:

$$\frac{d^2 E_1(z)}{dz^2} + \frac{\omega^2}{c^2} [(n_0 + i\xi)^2] E_1(z) = 0, \quad (5.173)$$

de manera que  $k = \frac{\omega}{c}(n_0 + i\xi)$  y tendremos los eigenvalores  $k_1 = +k$ ,  $k_2 = -k$  y las correspondientes eigenfunciones  $e^{ikz}$ ,  $e^{-ikz}$ . Podemos considerar este sistema como un caso particular del tratado en la sección 5.4 por tanto le aplican las mismas expresiones para las matrices y los coeficientes de reflexión y transmisión en términos de la matriz de transferencia asociada y en términos de la matriz híbrida bajo las mismas condiciones de contorno. Para incidencia normal tendremos que:

$$\begin{pmatrix} r_c \\ t_c \end{pmatrix} = \left[ \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & n_{cr} \end{pmatrix} - \mathbf{T}(z_R, z_L) \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -n_a & 0 \end{pmatrix} \right]^{-1} \cdot \mathbf{T}(z_R, z_L) \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ n_a \end{pmatrix}; \quad (5.174)$$

$$\begin{pmatrix} r_c \\ t_c \end{pmatrix} = \left[ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & n_{cr} \end{pmatrix} - \mathbf{H}(z_R, z_L) \cdot \begin{pmatrix} -n_a & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right]^{-1} \cdot \left[ \mathbf{H}(z_R, z_L) \cdot \begin{pmatrix} n_a \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right]. \quad (5.175)$$

### 5.5.1 Resultado de cálculos numéricos

En la figura 5.19 se ha incluido el espectro de reflectancia calculado en términos de la matriz de transferencia asociada para el caso en que se desprecia la absorción del Silicio poroso. Como se esperaba se obtuvo alta reflectancia en el intervalo de longitudes de onda desde 250 nm hasta 1500 nm. Por otra parte para simular la fuerte absorción del Silicio poroso en la región 250-413 nm se asumió un coeficiente de extinción  $\xi = 0.08$ . Para longitudes de onda mayores se consideró un coeficiente de extinción mucho menor  $\xi = 0.0013$ . Estos valores fueron estimados a partir de espectros de coeficientes de absorción medidos experimentalmente [81]. El coeficiente de extinción varía con la longitud de onda sin embargo se utilizaron solo dos valores de  $\xi$  con el fin de simplificar los cálculos sin que con ello nos alejemos de nuestros objetivos.

Con el objetivo de analizar la estabilidad numérica de la matriz de transferencia asociada en presencia de absorción fuerte la reflectancia  $R_c = |r_c|^2$  fue calculada en términos de las matrices  $\mathbf{T}(z_R, z_L)$  y  $\mathbf{H}(z_R, z_L)$ . En el intervalo de longitudes de onda 250-300 nm se obtuvo  $10^{18} \leq |\text{Det} [\mathbf{T}(z_R, z_L)]| \leq 10^{23}$  y  $|\text{Det} [\mathbf{H}(z_R, z_L)]| \leq 1$  y los valores de reflectancia calculados con ayuda de la matriz de transferencia asociada difieren significativamente de los calculados con ayuda de la matriz híbrida como se muestra en la figura 5.19. Este resultado se debe a la inestabilidad numérica (problema  $\Omega - d$ ) que manifiesta la matriz  $\mathbf{T}$  en la región de longitudes de onda analizada. Por otra parte para longitudes de onda mayores donde la absorción es mucho menor, los espectros coinciden. En general la reflectancia se reduce en presencia de absorción como se esperaba.

Como veremos en el problema isotrópico que se analiza es posible obtener valores del coeficiente de reflexión  $r_c$  en términos de  $\mathbf{T}(z_R, z_L)$  tan exactos como los obtenidos con la matriz  $\mathbf{H}(z_R, z_L)$  independientemente de la inestabilidad numérica que manifiesta la matriz de transferencia asociada. Por ejemplo si utilizamos la expresión:

$$r_c = -\frac{n_{cr} T_{11} + n_a n_{cr} T_{12} - T_{21} - n_a T_{22}}{n_{cr} T_{11} - n_a n_{cr} T_{12} - T_{21} + n_a T_{22}}, \quad (5.176)$$

donde  $T_{11}$ ,  $T_{12}$ ,  $T_{21}$  y  $T_{22}$  representan los elementos matriciales de  $\mathbf{T}(z_R, z_L)$ . En este caso la inestabilidad numérica continua afectando la exactitud de los elementos matriciales de  $\mathbf{T}(z_R, z_L)$  pero el cociente de magnitudes planteado en (5.176) conduce a la cancelación de los errores por redondeo [25]. Como se explicó en la sección 1.6, el problema  $\Omega - d$  tiene su origen en los errores por redondeo. Probablemente esta cancelación de errores por redondeo sea la razón por la que en este problema isotrópico la inestabilidad numérica de la matriz de transferencia asociada (de orden  $2 \times 2$ ) no es percibida.

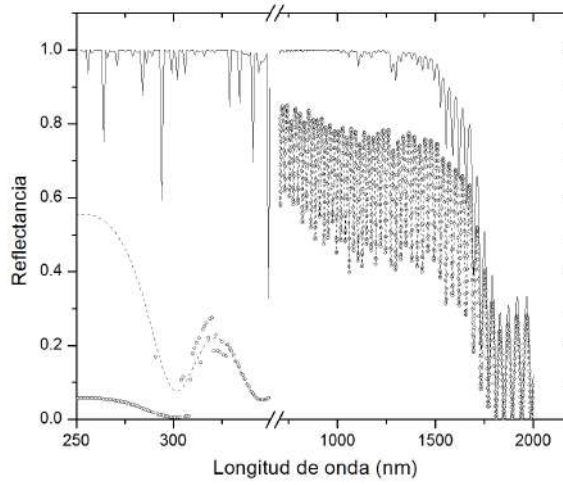


Figura 5.19: Espectro de reflectancia de un EFSP calculado para dos casos: 1) Despreciando la absorción del Silicio poroso y utilizando la matriz  $\mathbf{T}(z_R, z_L)$  (línea continua). 2) Considerando la absorción, utilizando la matriz  $\mathbf{H}(z_R, z_L)$  (línea discontinua) y utilizando la matriz  $\mathbf{T}(z_R, z_L)$  (círculos abiertos).

## 5.6 Superredes en doble capa de grafeno: Tunelaje de electrones

### 5.6.1 Introducción

Los sistemas basados en doble capa de grafeno (bilayer graphene, *en inglés*) presentan propiedades únicas que favorecen su aplicación en el campo de la nanotecnología. A diferencia de la monocapa de grafeno (MCG) en estos sistemas no se produce el tunelaje Klein, efecto relativista que consiste en la perfecta transmisión a través de una región clásicamente prohibida para la incidencia normal o cercana a esta [82]. Este tipo especial de tunelaje ocurre debido a la requerida conservación del pseudospin [82, 83]. En el caso de barreras electrostáticas en MCG, los portadores de baja energía cumplen la relación de dispersión lineal y las soluciones de la ecuación de onda tanto en pozos como en barreras corresponden a ondas propagantes de manera que dentro del pozo no existen estados cuasi-acotados [84]. En una doble capa de grafeno (DCG), el acoplamiento entre las capas transforma los fermiones de Dirac sin masa de la monocapa en partículas masivas quirales que tienen un espectro de energía parabólico [85, 86, 87, 88]. En este caso a diferencia de la monocapa, los espinores de Dirac tanto en regiones de pozos como en regiones de barreras son representados por una superposición lineal de estados evanescentes y estados propagantes

[82]. Estos fermiones de Dirac en la DCG exhiben casi cero transmisión a incidencia normal en fuerte contraste con la MCG [83].

En las DCG una característica particular del espectro de tunelaje son la resonancia Fano (RF) debidas a la superposición coherente de estados discretos (localizados) con un continuo de modos propagantes, las que se suponen ausentes en el espectro de transmisión balístico de la monocapa de grafeno [84]. Una de las principales características de la RF es su perfil asimétrico, resultado de la interacción de estados ya mencionada [89].

Debido a la dispersión abrupta que se observa en el perfil de resonancias fano, el estudio de este fenómeno de resonancia tiene importantes aplicaciones en sensores lasing, switching, y dispositivos no lineales [89, 90]. En adición a esto, la ausencia del tunelaje Klein, la presencia de una alta movilidad de portadores a temperatura ambiente ( $\sim 10000 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ), la posibilidad de suprimir considerablemente su conductividad mediante un campo externo perpendicular al plano [84, 88, 91] y la posibilidad de producción en masa, hacen de este material un candidato prometedor para la industria digital.

Probablemente los estudios más conocidos que abordan algunas de las propiedades de transmisión y transporte en DCG (coeficiente de transmisión, conductancia, tiempo de vida del tunelaje, etc.) se basan en sistemas con una [82] y dos barreras [83, 84] de potencial electrostático. Sin embargo, recientemente [92] se han realizado estudios de transmitancia y conductancia en superrredes confirmándose que ambas propiedades pueden ser moduladas ajustando los parámetros del sistema: ángulo de incidencia de los electrones, el número de barreras, los anchos de las barreras y pozos, y el alto de las barreras. Por ejemplo, con el aumento del número de barreras a incidencia normal la transmitancia disminuye fuertemente (aumenta el rango de energía donde vale cero), por lo que se hace presente de manera significativa el anti-tunelaje de Klein. En particular se aprecia que las resonancias fano, las cuáles aparecen bajo ángulos pequeños ( $1^\circ$  a  $4^\circ$ ) se desplazan a energías más altas con el aumento del número de barreras, perdiendo su forma característica (un mínimo profundo seguido de un máximo agudo) y dando lugar a picos tipo delta de Dirac. En general este resultado también se obtiene con el incremento de los anchos de pozos y barreras, y al aumentarse la altura de las barreras.

En los sistemas de DCG con multibarreras donde el perfil del potencial electrostático es como el de la figura 5.20, la transmitancia ( $T_c$ ) suele calcularse utilizando el método de la matrix de transferencia [83, 84, 92, 93], específicamente, algún tipo de matriz de transferencia de coeficientes  $\mathbf{K}$ . En este problema el cálculo de ( $T_c$ ) en términos de elementos de la matriz  $\mathbf{K}$  puede verse afectado por la inestabilidad numérica (problema  $\Omega - d$ ) que manifiesta dicha matriz para determinado número y altura de barreras, ancho de pozos y de barreras, energía de los electrones y ángulos de incidencia. La inestabilidad numérica de  $\mathbf{K}$  generalmente se manifiesta en valores de ( $T_c$ ) mayores que 1, sin embargo también pueden obtenerse valores inferiores a 1 incorrectos.

Si para calcular la conductancia balística  $G_b$  a temperatura cero Kelvin se utiliza la ecuación de Landauer-Büttiker [84, 94]:

$$G_b = G_{b0} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} T_c(E_f, E', \varphi) \cos \varphi d\varphi, \quad (5.177)$$

entonces valores incorrectos de ( $T_c$ ) conducirán a valores incorrectos de conductancia. Aquí  $G_{b0} = mv_f L_y / \pi \hbar$  (en unidades de  $e^2/h$ ),  $E_f$  y  $v_f$  son la energía y la velocidad de Fermi respectivamente y  $L_y$  es la longitud de la muestra en la dirección transversal (en nuestro caso eje  $y$ ). La expresión (5.177) considera la conductancia debida a una pequeña caída de potencial  $V = E' L_z$  aplicada a lo largo de la dirección de propagación (para nosotros el eje  $z$ ),  $L_z$  es la longitud de la muestra en esta dirección. En nuestro caso el campo eléctrico externo homogéneo  $E'$  es nulo y trabajamos con un perfil de potencial electrostático con altura de barreras  $V_0$  constante (figura 5.20).

En este problema estudiamos la degradación numérica (Problema  $\Omega - d$ ) que manifiesta la matriz de Transferencia de coeficientes ( $\mathbf{K}$ ) en el cálculo de transmitancia de portadores de carga en sistemas multibarreras en doble capa de grafeno y se muestra cómo el método de la matriz Híbrida ( $\mathbf{H}$ ) y el método de la matriz de dispersión ( $\mathbf{S}$ ) son técnicas apropiadas para evadir el problema  $\Omega - d$  en cualquier configuración del sistema (número y altura de barreras, ancho de pozos y de barreras, intervalo de energía de los electrones y ángulo de incidencia).

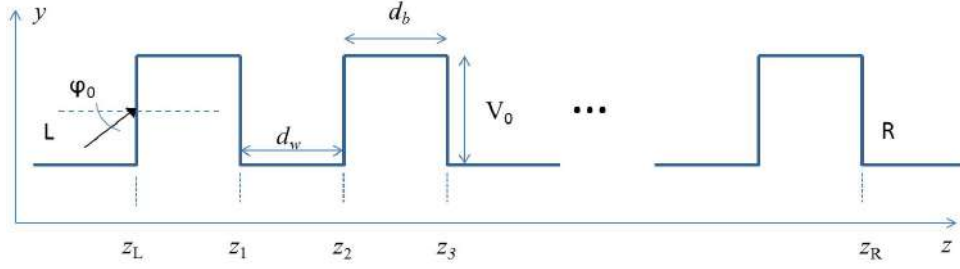


Figura 5.20: Perfil de potencial electrostático para una doble capa de Grafeno. Se muestra la altura de las barreras  $V_0$ , su ancho ( $d_b$ ), así como el de los pozos ( $d_w$ ). El ángulo de incidencia ( $\varphi_0$ ) es medido con respecto a la normal (que yace en el plano  $yz$ ) a la intercara pozo-barrera. Se indican además los dominios externos L y R.

### 5.6.2 Ecuación Sturm-Liouville matricial

La estructura de bandas electrónicas de la DCG puede ser descrita partiendo del modelo de amarre fuerte (tight-binding *en inglés*) [95, 96, 97, 98]. De este modo se obtiene que los portadores de carga en la doble capa de grafeno tienen un espectro de energía parabólico y son descritos por el siguiente Hamiltoniano cerca del punto de Dirac [82, 99, 100]:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \begin{pmatrix} 0 & (\kappa_z - i\kappa_y)^2 \\ (\kappa_z + i\kappa_y)^2 & 0 \end{pmatrix} + V(z) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (5.178)$$

donde  $\kappa_z, \kappa_y$  son los vectores de onda de las cuasipartículas a lo largo de los ejes  $z$  y  $y$  respectivamente. En nuestra notación el eje  $z$  va dirigido en la dirección normal a las intercara pozo-barrera y el movimiento de los portadores de carga es confinado en el plano  $yz$ . El ángulo de incidencia de los electrones es medido con respecto la dirección normal a las intercara pozo-barrera. Trabajaremos con barreras de altura constante, entonces  $V(z) = V_0$ , ver figura 5.20.

Para las cuasi partículas con energía  $E$  la ecuación a resolver será:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \begin{pmatrix} 0 & (\kappa_z - i\kappa_y)^2 \\ (\kappa_z + i\kappa_y)^2 & 0 \end{pmatrix} + V(z) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right] \cdot \begin{vmatrix} \psi_1(y, z) \\ \psi_2(y, z) \end{vmatrix} = E \begin{vmatrix} \psi_1(y, z) \\ \psi_2(y, z) \end{vmatrix}, \quad (5.179)$$

donde la función de onda (del pseudo-spin) tiene dos componentes:  $\psi_1(y, z)$  y  $\psi_2(y, z)$  para indicar los estados de la subred A (subíndice 1) y de la subred B (subíndice 2) que conforman la red cristalina del grafeno [100].

Si tenemos en cuenta que la componente  $y$  del momento de las cuasipartículas conmuta con el Hamiltoniano [101] (invariancia traslacional en la dirección  $y$ ) los pseudo-espinores pueden ser escritos como un producto de funciones:

$$\begin{vmatrix} \psi_1(y, z) \\ \psi_2(y, z) \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \psi_1(z) \\ \psi_2(z) \end{vmatrix} e^{i\kappa_y y}. \quad (5.180)$$

Entonces, tomando  $\kappa_z = -i \frac{d}{dz}$  y considerando el perfil de potencial de la figura 5.20 la ecuación de eigenvalores resulta:

$$\left[ \begin{array}{cc} V_0 & \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{d^2}{dz^2} + 2\kappa_y \frac{d}{dz} + \kappa_y^2 \right) \\ \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{d^2}{dz^2} - 2\kappa_y \frac{d}{dz} + \kappa_y^2 \right) & V_0 \end{array} \right] \begin{vmatrix} \psi_1(z) \\ \psi_2(z) \end{vmatrix} = E \begin{vmatrix} \psi_1(z) \\ \psi_2(z) \end{vmatrix}. \quad (5.181)$$

Escribamos (5.181) así:

$$\left[ \begin{array}{cc} V_0 - E & \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + \frac{\hbar^2}{m} \kappa_y \frac{d}{dz} + \frac{\hbar^2}{2m} \kappa_y^2 \\ \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} - \frac{\hbar^2}{m} \kappa_y \frac{d}{dz} + \frac{\hbar^2}{2m} \kappa_y^2 & V_0 - E \end{array} \right] \begin{vmatrix} \psi_1(z) \\ \psi_2(z) \end{vmatrix} = \mathbf{0}_{2 \times 1}. \quad (5.182)$$

Entonces llevada a la forma Sturm-Liouville Matricial (ESLM) la ecuación 5.182 resulta:

$$\mathbf{B} \frac{d^2 \mathbf{F}(z)}{dz^2} + (\mathbf{P} + \mathbf{Y}) \frac{d\mathbf{F}(z)}{dz} + \mathbf{W} \cdot \mathbf{F}(z) = \mathbf{0}_{2 \times 1}, \quad (5.183)$$

donde:

$$\mathbf{F}(z) = \begin{vmatrix} \psi_1(z) \\ \psi_2(z) \end{vmatrix}, \quad (5.184)$$

$$\mathbf{B} = \frac{\hbar^2}{2m} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}; \quad (5.185)$$

$$\mathbf{P} + \mathbf{Y} = \frac{\hbar^2}{m} \kappa_y \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}; \quad (5.186)$$

$$\mathbf{W} = \begin{bmatrix} V_0 - E & \frac{\hbar^2}{2m} \kappa_y^2 \\ \frac{\hbar^2}{2m} \kappa_y^2 & V_0 - E \end{bmatrix}. \quad (5.187)$$

Las soluciones Linealmente Independientes (LI) del sistema diferencial (5.183) se pueden plantear en la forma de exponenciales:

$$\Psi(z) = \begin{vmatrix} \psi_1(z) \\ \psi_2(z) \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \psi_{01} \\ \psi_{02} \end{vmatrix} e^{ikz}, \quad (5.188)$$

y obtenemos el siguiente problema cuadrático de eigenvalores (QEP):

$$(-k^2 \mathbf{B} + ik(\mathbf{P} + \mathbf{Y}) + \mathbf{W}) \cdot \begin{vmatrix} \psi_{01} \\ \psi_{02} \end{vmatrix} = \mathbf{0}_{2 \times 1}, \quad (5.189)$$

o lo que es igual:

$$\begin{bmatrix} V_0 - E & \frac{\hbar^2}{2m} (ik + \kappa_y)^2 \\ \frac{\hbar^2}{2m} (ik - \kappa_y)^2 & V_0 - E \end{bmatrix} \cdot \begin{vmatrix} \psi_{01} \\ \psi_{02} \end{vmatrix} = \mathbf{0}_{2 \times 1}, \quad (5.190)$$

cuyas soluciones resultan en los eigenvalores  $k_\ell$  y las correspondientes eigenfunciones  $\Psi_\ell(z)$ . Como la matriz  $\mathbf{B}$  es *regular* ( $\text{Det} [\mathbf{B}] \neq 0$ ) tendremos un conjunto de eigenvalores  $K = \{k_\ell, \ell = 1, 2, 3, 4\}$  y las correspondientes eigenfunciones:

$$\Psi_\ell(z) = \begin{vmatrix} \psi_{01,\ell} \\ \psi_{02,\ell} \end{vmatrix} e^{ik_\ell z}. \quad (5.191)$$

Por otra parte, dado que  $\mathbf{B}$  es hermítica,  $\mathbf{P} + \mathbf{Y}$  es antihermítica y  $\mathbf{W}$  es hermítica, se cumple la hermiticidad formal del operador Sturm-Liouville matricial  $\mathbf{L}$  y los eigenvalores cumplen la propiedad general: pueden ser reales o formar pares del tipo  $(k_\ell; k_\ell^*)$ .

Las soluciones del QEP son, para las barreras:

$$k_{1b} = +\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) - \kappa_y^2}, \quad (5.192)$$

$$k_{2b} = -k_{1b}, \quad (5.193)$$

$$k_{3b} = -i\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) + \kappa_y^2}, \quad (5.194)$$

$$k_{4b} = -k_{3b}; \quad (5.195)$$

$$\Psi_{\ell b}(z) = \left| \begin{array}{c} \frac{\hbar^2}{2m}(\kappa_y + ik_{\ell b})^2 \\ E - V_0 \end{array} \right| e^{ik_{\ell b}z}; \quad \ell = 1, 2, 3, 4, \quad (5.196)$$

y para los pozos:

$$k_{1w} = +\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E - \kappa_y^2} = +p, \quad (5.197)$$

$$k_{2w} = -k_{1w}, \quad (5.198)$$

$$k_{3w} = -i\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E + \kappa_y^2} = -iq, \quad (5.199)$$

$$k_{4w} = -k_{3w}; \quad (5.200)$$

$$\Psi_{\ell w}(z) = \left| \begin{array}{c} \frac{\hbar^2}{2m}(\kappa_y + ik_{\ell w})^2 \\ E \end{array} \right| e^{ik_{\ell w}z}; \quad \ell = 1, 2, 3, 4, \quad (5.201)$$

donde:

$$\kappa_y = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E} \sin \varphi_0. \quad (5.202)$$

En forma compacta podemos expresar:

$$\begin{aligned} \Psi_{\ell w}(z) &= \Psi_{0\ell w} e^{ik_{\ell w}z} \\ \Psi_{\ell b}(z) &= \Psi_{0\ell b} e^{ik_{\ell b}z} \end{aligned} \quad (5.203)$$

Nótese que en este problema los eigenvalores también forman pares del tipo  $(k_\ell; -k_\ell)$ . En este ejemplo no hemos normalizado la base de soluciones LI para evitar los denominadores en los términos  $\psi_{01,\ell}$  o  $\psi_{02,\ell}$  que se puedan anular en los cálculos que contemplen contornos  $(E, \varphi_0)$  donde las energías van de 0 a 0.25 eV y los ángulos de incidencia de  $-\pi/2$  a  $\pi/2$ .

Por otra parte, las formas lineales  $\mathbf{A}_\ell(z) = \mathbf{B} \cdot \frac{d\Psi_\ell(z)}{dz} + \mathbf{P} \cdot \Psi_\ell(z)$  serán (ver apéndice P):

Para las barreras

$$\mathbf{A}_{\ell b}(z) = \left| \begin{array}{c} \frac{\hbar^2}{2m}(E - V_0)(\kappa_y + ik_{\ell b}) \\ -\frac{\hbar^2}{2m}(E - V_0)(\kappa_y + ik_{\ell b}) \end{array} \right| e^{ik_{\ell b}z}; \quad \ell = 1, 2; \quad (5.204)$$

$$\mathbf{A}_{\ell b}(z) = \left| \begin{array}{c} \frac{\hbar^2}{2m}(E - V_0)(\kappa_y + ik_{\ell b}) \\ \frac{\hbar^2}{2m}(E - V_0)(\kappa_y + ik_{\ell b}) \end{array} \right| e^{ik_{\ell b}z}; \quad \ell = 3, 4, \quad (5.205)$$

y para los pozos:

$$\mathbf{A}_{\ell w}(z) = \left| \begin{array}{c} \frac{\hbar^2}{2m}E(\kappa_y + ik_{\ell w}) \\ -\frac{\hbar^2}{2m}E(\kappa_y + ik_{\ell w}) \end{array} \right| e^{ik_{\ell w}z}; \quad \ell = 1, 2; \quad (5.206)$$

$$\mathbf{A}_{\ell w}(z) = \left| \begin{array}{c} \frac{\hbar^2}{2m}E(\kappa_y + ik_{\ell w}) \\ \frac{\hbar^2}{2m}E(\kappa_y + ik_{\ell w}) \end{array} \right| e^{ik_{\ell w}z}; \quad \ell = 3, 4, \quad (5.207)$$

En forma compacta podemos expresar:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_{\ell w}(z) &= \mathbf{A}_{0\ell w} e^{ik_{\ell w}z} \\ \mathbf{A}_{\ell b}(z) &= \mathbf{A}_{0\ell b} e^{ik_{\ell b}z} \end{aligned} \quad (5.208)$$



### 5.6.3 Condiciones de contorno

Este problema corresponde al tipo de Barrera finita (sección 4.1.1) de manera que tendremos condiciones de empalme total (FM) en las intercaras que empalman la heteroestructura con los dominios externos L y R y se deben imponer dos condiciones más:

1. En el dominio externo R no habrá onda reflejada y,
2. La finitud de la función de onda  $\forall z$ .

A partir de la base de eigenfunciones, para el dominio externo R podemos plantear:

$$\Psi_R(z) = a_1(\mathbf{R})\Psi_{1w}(z) + a_2(\mathbf{R})\Psi_{2w}(z) + a_3(\mathbf{R})\Psi_{3w}(z) + a_4(\mathbf{R})\Psi_{4w}(z); \quad (5.209)$$

y para el dominio externo L

$$\Psi_L(z) = a_1(\mathbf{L})\Psi_{1w}(z) + a_2(\mathbf{L})\Psi_{2w}(z) + a_3(\mathbf{L})\Psi_{3w}(z) + a_4(\mathbf{L})\Psi_{4w}(z), \quad (5.210)$$

donde  $\{a_\ell(\mathbf{L})\}/\{a_\ell(\mathbf{R})\}$ ,  $\ell = 1, 2, 3, 4$  es el conjunto de coeficientes de expansión para el dominio externo L/R.

En (5.209) y (5.210) tenemos la combinación de cuatro posibles ondas: dos ondas de electrones libres y dos ondas evanescentes-divergentes. De acuerdo con las expresiones de los eigenvalores  $k_{\ell w}$  para garantizar que no haya onda reflejada en el dominio externo R debemos hacer  $a_2(\mathbf{R}) = 0$ . Por otra parte, dado que  $k_{3w} = -iq$  y  $k_{4w} = iq$  tenemos que el término exponencial en  $\Psi_{4w}$  será  $e^{-qz}$  y tenderá al infinito en el dominio L cuando  $z \rightarrow -\infty$  y el término exponencial en  $\Psi_{3w}$  será  $e^{qz}$  y tenderá al infinito en el dominio R cuando  $z \rightarrow +\infty$ . Esto significa que para cumplir la segunda condición de contorno debemos hacer  $a_4(\mathbf{L}) = 0$  y  $a_3(\mathbf{R}) = 0$ .

Resumiendo; en el dominio externo R tendremos que:

$$\begin{aligned} \Psi_R(z) &= a_1(\mathbf{R})\Psi_{1w}(z) + a_4(\mathbf{R})\Psi_{4w}(z); \\ \mathbf{A}_R(z) &= a_1(\mathbf{R})\mathbf{A}_{1w}(z) + a_4(\mathbf{R})\mathbf{A}_{4w}(z), \end{aligned} \quad (5.211)$$

y en el dominio externo L:

$$\begin{aligned} \Psi_L(z) &= a_1(\mathbf{L})\Psi_{1w}(z) + a_2(\mathbf{L})\Psi_{2w}(z) + a_3(\mathbf{L})\Psi_{3w}(z); \\ \mathbf{A}_L(z) &= a_1(\mathbf{L})\mathbf{A}_{1w}(z) + a_2(\mathbf{L})\mathbf{A}_{2w}(z) + a_3(\mathbf{L})\mathbf{A}_{3w}(z). \end{aligned} \quad (5.212)$$

En lo adelante para que las matrices de trabajo resulten en términos de los anchos de pozos ( $d_w$ ) y barreras ( $d_b$ ) utilizaremos bases reducidas de soluciones LI. Para ilustrar esto seleccionemos una celda unitaria de nuestra heteroestructura comprendida entre las coordenadas  $z_1$  y  $z_3$ , ver figura 5.20. Si en el dominio del pozo seleccionamos una base reducida en  $z_1$ , esto quiere decir que los términos exponenciales de las eigenfunciones  $\Psi_{\ell w}(z)$  resultan  $e^{ik_{\ell w}(z-z_1)}$ . Por otra parte, si en el dominio de la barrera seleccionamos una base reducida en  $z_2$ , esto quiere decir que los términos exponenciales de las eigenfunciones  $\Psi_{\ell b}(z)$  resultan  $e^{ik_{\ell b}(z-z_2)}$ .

### 5.6.4 Cálculo de la transmitancia en términos de la matriz $\mathbf{K}$ ( $4 \times 4$ )

Para obtener una expresión de la matriz  $\mathbf{K}_b$  que relacione coeficientes a ambos lados de una barrera tomaremos nuevamente de ejemplo la celda unitaria comprendida entre las coordenadas  $z_1$  y  $z_3$ , ver figura 5.20. Utilizaremos la expresión que relaciona la matriz  $\mathbf{K}$  con la matriz  $\mathbf{T}$  (3.19) considerando que ahora la región intermedia M es la barrera y el dominio L/R es el pozo ubicado a su izquierda/derecha:

$$\mathbf{K}_b = \mathbf{Q}(\mathbf{R} : z_3)^{-1} \cdot \mathbf{T}(z_3, z_2) \cdot \mathbf{Q}(\mathbf{L} : z_2). \quad (5.213)$$

Tomando una base reducida en  $z_1$  para el pozo ubicado a la izquierda de la barrera, con ayuda de (5.203) y (5.208) tendremos que:

$$\mathbf{Q}(L : z_2) = \begin{pmatrix} \Psi_{01w} e^{ik_{1w}d_w} & \Psi_{04w} e^{ik_{4w}d_w} & \Psi_{02w} e^{ik_{2w}d_w} & \Psi_{03w} e^{ik_{3w}d_w} \\ \mathbf{A}_{01w} e^{ik_{1w}d_w} & \mathbf{A}_{04w} e^{ik_{4w}d_w} & \mathbf{A}_{02w} e^{ik_{2w}d_w} & \mathbf{A}_{03w} e^{ik_{3w}d_w} \end{pmatrix}. \quad (5.214)$$

Tomando una base reducida en  $z_2$  para la barrera, con ayuda de (5.203) y (5.208) tendremos que:

$$\mathbf{T}(z_3, z_2) = \begin{pmatrix} \Psi_{01b} e^{ik_{1b}d_b} & \Psi_{04b} e^{ik_{4b}d_b} & \Psi_{02b} e^{ik_{2b}d_b} & \Psi_{03b} e^{ik_{3b}d_b} \\ \mathbf{A}_{01b} e^{ik_{1b}d_b} & \mathbf{A}_{04b} e^{ik_{4b}d_b} & \mathbf{A}_{02b} e^{ik_{2b}d_b} & \mathbf{A}_{03b} e^{ik_{3b}d_b} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \Psi_{01b} & \Psi_{04b} & \Psi_{02b} & \Psi_{03b} \\ \mathbf{A}_{01b} & \mathbf{A}_{04b} & \mathbf{A}_{02b} & \mathbf{A}_{03b} \end{pmatrix}^{-1}. \quad (5.215)$$

Tomando una base reducida en  $z_3$  para el pozo ubicado a la derecha de la barrera, con ayuda de (5.203) y (5.208) tendremos que:

$$\mathbf{Q}(R : z_3) = \begin{pmatrix} \Psi_{01w} & \Psi_{04w} & \Psi_{02w} & \Psi_{03w} \\ \mathbf{A}_{01w} & \mathbf{A}_{04w} & \mathbf{A}_{02w} & \mathbf{A}_{03w} \end{pmatrix}. \quad (5.216)$$

Es fácil demostrar algebraicamente que el determinante de  $\mathbf{K}_b$ , así como el de la matriz  $\mathbf{K}$  correspondiente a cualquier número de barreras es 1 (apéndice Q).

La matriz  $\mathbf{K}_m$  correspondiente a  $m$  barreras se determina con ayuda de la regla de composición de la matriz de transferencia de coeficientes, expresión (3.25):

$$\mathbf{K}_m = \mathbf{K}_b \cdot \mathbf{K}_{m-1}. \quad (5.217)$$

Luego, para la matriz  $\mathbf{K}(R, L)$  que relaciona los coeficientes de expansión del dominio R con los del dominio L tendremos que:

$$\begin{vmatrix} a_1(R) \\ a_4(R) \\ a_2(R) \\ a_3(R) \end{vmatrix} = \mathbf{K}(R, L) \cdot \begin{vmatrix} a_1(L) \\ a_4(L) \\ a_2(L) \\ a_3(L) \end{vmatrix}. \quad (5.218)$$

Finalmente considerando las condiciones de contorno tenemos que:

$$\begin{vmatrix} a_1(R) \\ a_4(R) \\ 0 \\ 0 \end{vmatrix} = \mathbf{K}(R, L) \cdot \begin{vmatrix} a_1(L) \\ 0 \\ a_2(L) \\ a_3(L) \end{vmatrix}, \quad (5.219)$$

de aquí que en términos de los elementos matriciales de  $\mathbf{K}(R, L)$  tengamos que:

$$\frac{a_1(R)}{a_1(L)} = (\mathbf{K}_{11} - \mathbf{K}_{12} \cdot [\mathbf{K}_{22}]^{-1} \cdot \mathbf{K}_{21})_{11}. \quad (5.220)$$

Para simplificar la expresión anterior se suprimió el argumento zonal R, L de la matriz  $\mathbf{K}(R, L)$  en sus particiones de orden  $N \times N$ . Nótese que el miembro derecho de (5.220) es precisamente  $[\mathbf{S}_{21}]_{11}$  (ver relaciones (3.28)).

La transmitancia será  $T_c = |a_1(R)/a_1(L)|^2$ .

### 5.6.5 Cálculo de la transmitancia en términos de la matriz $\mathbf{H}$ ( $4 \times 4$ )

Para obtener la expresión de la matriz  $\mathbf{H}_b$  correspondiente a una barrera retomamos el ejemplo de la celda unitaria comprendida entre las coordenadas  $z_1$  y  $z_3$ , ver figura 5.20. Utilizaremos la expresión que permite calcular la matriz  $\mathbf{H}$  en un dominio donde se conoce una base de soluciones LI (3.34).

Tomando una base reducida en  $z_2$  para la barrera, con ayuda de (5.203) y (5.208) tendremos que:

$$\mathbf{H}_b = \begin{pmatrix} \Psi_{01b} & \Psi_{02b} & \Psi_{03b} & \Psi_{04b} \\ \mathbf{A}_{01b} e^{ik_{1b}d_b} & \mathbf{A}_{02b} e^{ik_{2b}d_b} & \mathbf{A}_{03b} e^{ik_{3b}d_b} & \mathbf{A}_{04b} e^{ik_{4b}d_b} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{01b} & \mathbf{A}_{02b} & \mathbf{A}_{03b} & \mathbf{A}_{04b} \\ \Psi_{01b} e^{ik_{1b}d_b} & \Psi_{02b} e^{ik_{2b}d_b} & \Psi_{03b} e^{ik_{3b}d_b} & \Psi_{04b} e^{ik_{4b}d_b} \end{pmatrix}^{-1}. \quad (5.221)$$

Análogamente, tomando una base reducida en  $z_1$  en el dominio del pozo izquierdo, con ayuda de (5.203) y (5.208) tendremos, para cualquier pozo, que:

$$\mathbf{H}_w = \begin{pmatrix} \Psi_{01w} & \Psi_{02w} & \Psi_{03w} & \Psi_{04w} \\ \mathbf{A}_{01w} e^{ik_{1w}d_w} & \mathbf{A}_{02w} e^{ik_{2w}d_w} & \mathbf{A}_{03w} e^{ik_{3w}d_w} & \mathbf{A}_{04w} e^{ik_{4w}d_w} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{01w} & \mathbf{A}_{02w} & \mathbf{A}_{03w} & \mathbf{A}_{04w} \\ \Psi_{01w} e^{ik_{1w}d_w} & \Psi_{02w} e^{ik_{2w}d_w} & \Psi_{03w} e^{ik_{3w}d_w} & \Psi_{04w} e^{ik_{4w}d_w} \end{pmatrix}^{-1}. \quad (5.222)$$

Para  $m$  barreras la matriz Híbrida  $\mathbf{H}_{mb}$  se determina con ayuda de la regla de composición correspondiente (sección 3.3.1). Para efectos prácticos es conveniente determinar primero la matriz  $\mathbf{H}_{cu}$  correspondiente a la celda unitaria:

$$\mathbf{H}_{cu} = \mathbf{H}_b \otimes \mathbf{H}_w. \quad (5.223)$$

Luego para dos barreras tendremos:

$$\mathbf{H}_{2b} = \mathbf{H}_{cu} \otimes \mathbf{H}_b, \quad (5.224)$$

y así sucesivamente:

$$\mathbf{H}_{mb} = \mathbf{H}_{cu} \otimes \mathbf{H}_{(m-1)b}. \quad (5.225)$$

Denotemos con  $\mathbf{H}(z_R, z_L)$  la matriz híbrida que relaciona campo y la forma diferencial lineal correspondiente en los extremos izquierdo y derecho del sistema de la figura 5.20 dados por las coordenadas  $z_L$  y  $z_R$  respectivamente. Entonces, por definición:

$$\begin{bmatrix} \Psi_L(z_L) \\ \mathbf{A}_R(z_R) \end{bmatrix} = \mathbf{H}(z_R, z_L) \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{A}_L(z_L) \\ \Psi_R(z_R) \end{bmatrix}. \quad (5.226)$$

A partir de esta expresión podemos calcular el coeficiente de transmisión  $t_c = a_1(\mathbf{R})/a_1(\mathbf{L})$  y de este la transmitancia  $T_c = |t_c|^2$ . Para ello conviene expresar el campo y la forma diferencial lineal, dados en (5.211) y (5.212) en términos de una base de eigenfunciones reducida en  $z_L/z_R$  respectivamente. De esta forma tendremos que:

$$\begin{aligned} \Psi_R(z_R) &= a_1(\mathbf{R})\Psi_{01w} + a_4(\mathbf{R})\Psi_{04w}; \\ \mathbf{A}_R(z_R) &= a_1(\mathbf{R})\mathbf{A}_{01w} + a_4(\mathbf{R})\mathbf{A}_{04w}, \end{aligned} \quad (5.227)$$

y:

$$\begin{aligned} \Psi_L(z_L) &= a_1(\mathbf{L})\Psi_{01w} + a_2(\mathbf{L})\Psi_{02w} + a_3(\mathbf{L})\Psi_{03w}; \\ \mathbf{A}_L(z_L) &= a_1(\mathbf{L})\mathbf{A}_{01w} + a_2(\mathbf{L})\mathbf{A}_{02w} + a_3(\mathbf{L})\mathbf{A}_{03w}. \end{aligned} \quad (5.228)$$

Sustituyendo estas expresiones en (5.226), después de un poco de álgebra se obtiene que:

$$\begin{vmatrix} a_2(\mathbf{L})/a_1(\mathbf{L}) \\ a_3(\mathbf{L})/a_1(\mathbf{L}) \\ a_1(\mathbf{R})/a_1(\mathbf{L}) \\ a_4(\mathbf{R})/a_1(\mathbf{L}) \end{vmatrix} = [\mathbf{M}_1 - \mathbf{H}(z_R, z_L) \cdot \mathbf{M}_2]^{-1} \cdot \left\{ \mathbf{H}(z_R, z_L) \cdot \begin{vmatrix} \mathbf{A}_{01w} \\ \mathbf{0}_{2 \times 1} \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} \Psi_{01w} \\ \mathbf{0}_{2 \times 1} \end{vmatrix} \right\}, \quad (5.229)$$

donde:

$$\mathbf{M}_1 = \begin{pmatrix} \Psi_{02w} & \Psi_{03w} & \mathbf{0}_{2 \times 1} & \mathbf{0}_{2 \times 1} \\ \mathbf{0}_{2 \times 1} & \mathbf{0}_{2 \times 1} & \mathbf{A}_{01w} & \mathbf{A}_{04w} \end{pmatrix}; \quad (5.230)$$

$$\mathbf{M}_2 = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{02w} & \mathbf{A}_{03w} & \mathbf{0}_{2 \times 1} & \mathbf{0}_{2 \times 1} \\ \mathbf{0}_{2 \times 1} & \mathbf{0}_{2 \times 1} & \Psi_{01w} & \Psi_{04w} \end{pmatrix}. \quad (5.231)$$

### 5.6.6 Cálculo de la transmitancia en términos de la matriz $\mathbf{S}$ ( $4 \times 4$ )

Para el cálculo de la matriz de dispersión se hizo uso de la expresión (3.50) que relaciona a esta matriz con la matriz híbrida. Para este problema consideramos que el dominio interno M es una barrera de potencial (figura 5.20) y por ende el dominio L/R es el pozo a su izquierda/derecha.

Como primer paso se determinó la matriz híbrida para una barrera con ayuda de la expresión (5.221). Las matrices  $\mathbf{Q}(L : z_L)$  y  $\mathbf{Q}(R : z_R)$  se construyeron utilizando bases reducidas en la coordenada izquierda del respectivo pozo, resultando:

$$\mathbf{Q}(L : z_L) = \begin{pmatrix} \Psi_{01w} e^{ik_{1w}d_w} & \Psi_{04w} e^{ik_{4w}d_w} & \Psi_{02w} e^{ik_{2w}d_w} & \Psi_{03w} e^{ik_{3w}d_w} \\ \mathbf{A}_{01w} e^{ik_{1w}d_w} & \mathbf{A}_{04w} e^{ik_{4w}d_w} & \mathbf{A}_{02w} e^{ik_{2w}d_w} & \mathbf{A}_{03w} e^{ik_{3w}d_w} \end{pmatrix}. \quad (5.232)$$

$$\mathbf{Q}(R : z_R) = \begin{pmatrix} \Psi_{01w} & \Psi_{04w} & \Psi_{02w} & \Psi_{03w} \\ \mathbf{A}_{01w} & \mathbf{A}_{04w} & \mathbf{A}_{02w} & \mathbf{A}_{03w} \end{pmatrix}. \quad (5.233)$$

Las expresiones (5.221), (5.232) y (5.233) fueron sustituidas en (3.50) para obtener la matriz de dispersión que relaciona coeficientes a ambos lados de una barrera y que denotamos  $\mathbf{S}(W; W)$ .

Consideremos toda la heteroestructura de manera que ahora el dominio interno M contiene todas las capas de esta y  $\mathbf{S}(R; L)$  es la matriz de dispersión que relaciona los coeficientes en el dominio externo R con los coeficientes en el dominio externo L:

$$\begin{pmatrix} a_2(L) \\ a_3(L) \\ a_1(R) \\ a_4(R) \end{pmatrix} = \mathbf{S}(R; L) \cdot \begin{pmatrix} a_1(L) \\ a_4(L) \\ a_2(R) \\ a_3(R) \end{pmatrix}. \quad (5.234)$$

Esta matriz se calculó a partir de la matriz  $\mathbf{S}(W; W)$  aplicando la regla de composición correspondiente (3.67). Comenzando por el extremo izquierdo de la figura 5.20. Para un sistema de dos celdas unitarias tendremos que:

$$\mathbf{S}(R; L) = \mathbf{S}(W; W)_2 = \mathbf{S}(W; W) \otimes \mathbf{S}(W; W), \quad (5.235)$$

para un sistema de tres celdas unitarias:

$$\mathbf{S}(R; L) = \mathbf{S}(W; W)_3 = \mathbf{S}(W; W) \otimes \mathbf{S}(W; W)_2, \quad (5.236)$$

y así sucesivamente, entonces si la heteroestructura se compone de  $m$  celdas unitarias tendremos:

$$\mathbf{S}(R; L) = \mathbf{S}(W; W) \otimes \mathbf{S}(W; W)_{m-1}. \quad (5.237)$$

Si consideramos las condiciones de contorno, entonces:

$$\begin{pmatrix} a_2(L) \\ a_3(L) \\ a_1(R) \\ a_4(R) \end{pmatrix} = \mathbf{S}(R; L) \cdot \begin{pmatrix} a_1(L) \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (5.238)$$

De aquí se obtiene directamente que:

$$\frac{a_1(\mathbf{R})}{a_1(\mathbf{L})} = \mathbf{S}(\mathbf{R}; \mathbf{L})_{31}. \quad (5.239)$$

La transmitancia será:  $T_c = |a_1(\mathbf{R})/a_1(\mathbf{L})|^2 = |\mathbf{S}(\mathbf{R}; \mathbf{L})_{31}|^2$ . Con  $\mathbf{S}(\mathbf{R}; \mathbf{L})_{31}$  denotamos el elemento matricial de fila 3 y columna 1 en la matriz  $\mathbf{S}(\mathbf{R}; \mathbf{L})$ .

### 5.6.7 Resultado de los cálculos numéricos

Antes de realizar los cálculos de transmitancia en términos de las matrices  $\mathbf{K}$ ,  $\mathbf{H}$  y  $\mathbf{S}$  para diferentes configuraciones del sistema, se decidió realizar una prueba para validar nuestros programas numéricos. Consiste en reproducir el espectro de transmitancia  $T_c$  como función de la energía  $E$  de los electrones incidentes para un sistema de dos barreras de potencial en doble capa de grafeno obtenido por S. Mukhopadhyay, et al., en la Figura 2 (a) de la referencia [83]. La configuración del sistema es: 1) ancho de barreras y pozos  $d_b = d_w = 10$  nm; 2) altos de barreras  $V_0 = 50$  meV; 3) los ángulos de incidencia  $\varphi_0 = 0^\circ, 5^\circ, 10^\circ$  y  $30^\circ$ . En los cálculos se tomó la masa efectiva igual a  $0.035 m_0$  [83, 84], donde  $m_0$  es la masa en reposo del electrón. En la figura 5.21 se muestran nuestros resultados (para los mismos parámetros del sistema) coinciden con los obtenidos en [83].

El espectro de transmitancia obtenido en términos de la matriz  $\mathbf{H}$  coincide con el obtenido en términos de  $\mathbf{S}$  y con el obtenido en términos de  $\mathbf{K}$  que en este caso es numéricamente estable en el rango de energías y ángulos analizado. Esta coincidencia puede observarse en la figura 5.22 para el espectro correspondiente a  $\varphi_0 = 10^\circ$  abordado en la figura 5.21. Los resultados confirman que los valores de transmitancia calculados con nuestros programas numéricos son correctos.

### Comportamiento de la estabilidad numérica de $\mathbf{K}$ con el incremento del ancho de pozos y barreras

Al sistema de dos barreras que seleccionó para realizar la prueba anterior se le incrementó el ancho de barreras y pozos manteniendo fija la altura de las barreras en  $V_0 = 50$  meV. Entonces se calculó  $T_c$  en términos de  $\mathbf{K}$  para la configuración anterior  $d_b = d_w = 10$  nm y para  $d_b = d_w = 30$  nm en el intervalo de energías  $0 < E < 0.05$  eV y de ángulos  $-\pi/2 < \varphi_0 < \pi/2$ . Para chequear la estabilidad numérica de  $\mathbf{K}$  se calculó el módulo de su determinante ( $|\text{Det}[\mathbf{K}]|$ ) por cada valor de  $T_c$  calculado.

El diagrama de contorno mostrado en la figura 5.23 indica que para  $d_b = d_w = 10$  nm la matriz  $\mathbf{K}$  se comporta de forma numéricamente estable. Sin embargo para la configuración de anchos  $d_b = d_w = 30$  nm la matriz  $\mathbf{K}$  manifiesta inestabilidad numérica en el intervalo de energías  $E$  y ángulos  $\varphi_0$  indicado. Como puede observarse en la tabla 5.3 en este caso se obtienen valores  $|\text{Det}[\mathbf{K}]|$  muy diferentes a 1 (valor predicho en el cálculo algebraico), valores de  $T_c$  superiores 1 y también valores incorrectos inferiores a 1. Nótese que la inestabilidad se manifiesta para ángulos de incidencia superiores a  $60^\circ$ . A modo de comparación se indican los valores obtenidos con  $\mathbf{H}$  y  $\mathbf{S}$ . Este resultado indica que con el aumento del ancho de pozos y barreras la matriz  $\mathbf{K}$  se hace más vulnerable al problema  $\Omega - d$  principalmente para ángulos de incidencia altos. La situación presentada es un ejemplo de caso en el que la aplicación de la expresión (5.177) conduce a valores incorrectos de conductancia.

El diagrama de contorno mostrado en la figura 5.24 confirma que para  $d_b = d_w = 30$  nm la matriz  $\mathbf{H}$  es numéricamente estable. El resultado es el mismo para la matriz  $\mathbf{S}$ .

### Comportamiento de la estabilidad numérica de $\mathbf{K}$ con el incremento del número barreras

Para analizar el efecto que produce el incremento del número de barreras en la estabilidad numérica de  $\mathbf{K}$  se estudió la configuración:  $d_b = d_w = 10$  nm;  $V_0 = 50$  meV y ángulo de incidencia  $\varphi_0 = 2.5^\circ$  para cuatro y ocho barreras. La transmitancia como función de la energía para ambos casos se muestra en la

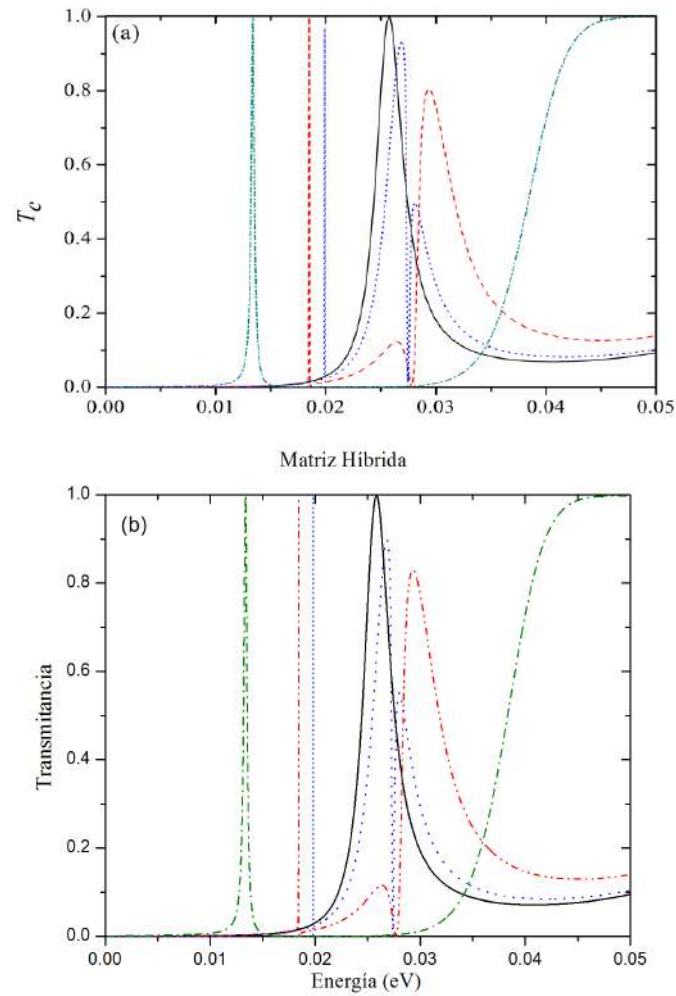


Figura 5.21: Transmitancia ( $T_c$ ) como función de la energía de los electrones incidentes ( $E$ ) para un sistema de dos barreras de potencial en DCG;  $d_b = d_w = 10$  nm,  $V_0 = 50$  meV. (a) Resultados obtenidos en [83] mediante una matriz de transferencia de coeficientes. (b) Nuestros resultados en términos de la matriz  $\mathbf{H}$ . Trazo color negro, para  $\varphi_0 = 0^\circ$ ; trazo azul, para  $\varphi_0 = 5^\circ$ ; trazo rojo, para  $\varphi_0 = 10^\circ$  y trazo color verde, para  $\varphi_0 = 30^\circ$ .

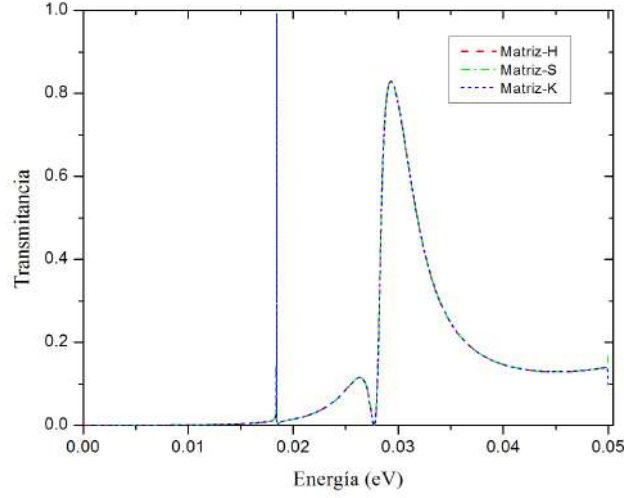


Figura 5.22: Comparación del espectro de transmitancia obtenido en términos de la matriz  $\mathbf{H}$ , de la matriz  $\mathbf{S}$  y de  $\mathbf{K}$  para el ángulo de incidencia  $\varphi_0 = 10^\circ$ . Sistema de dos barreras de potencial en DCG,  $d_b = d_w = 10$  nm,  $V_0 = 50$  meV.

figura 5.25. Se observa que con el aumento del número de barreras la degradación numérica (problema  $\Omega - d$ ) de la matriz  $\mathbf{K}$  comienza a manifestarse a energías más bajas, por lo que se incrementa la región de energías donde esta matriz es numéricamente inestable. Nótese que el espectro de transmitancia en términos de  $\mathbf{K}$ ,  $\mathbf{H}$  y  $\mathbf{S}$  coincide hasta que la matriz  $\mathbf{K}$  comienza a manifestar la inestabilidad numérica.

En la figura 5.26 muestra la estabilidad numérica de la matriz  $\mathbf{H}$  por medio del valor estable ( $=1$ ) del módulo de su determinante. Nótese que el módulo del determinante de  $\mathbf{K}$  puede tomar valores inadmisibles.

Energía (eV)	$\varphi_0$ (grados)	$ \text{Det}[\mathbf{K}] $	$T_c(\mathbf{K})$	$T_c(\mathbf{H}) / T_c(\mathbf{S})$	$ \text{Det}[\mathbf{H}] $
0.0181	-88.9	19.30	104.04	0.047	1
0.0181	-87.9	3.04	15.20	0.21	1
0.0181	86.1	3.96	17.3	0.98	1
0.0431	-89.9	$2.86 \times 10^8$	2.41	$6.63 \times 10^{-17}$	1
0.0451	-89.9	$7.28 \times 10^7$	5.07	$4.55 \times 10^{-17}$	1
0.0461	-61.9	159.93	7.47	0.000182	1
0.0481	-89.9	$1.19 \times 10^9$	4.25	$2.91 \times 10^{-17}$	1
0.0481	-78.9	84356.75	0.0050	$1.13 \times 10^{-12}$	1
0.0491	-89.9	$6.35 \times 10^8$	32.29	$2.58 \times 10^{-17}$	1
0.0491	-63.9	3689.15	0.023	$5.77 \times 10^{-8}$	1

Tabla 5.3: Ejemplo de inestabilidad numérica de la matriz  $\mathbf{K}$  para un sistema de doble barrera en DCG. Intervalo de energía  $0 < E < 0.05$  eV y ángulo de incidencia  $-90^\circ < \varphi_0 < 90^\circ$ . Ancho de barreras y pozos  $d_b = d_w = 30$  nm;  $V_0 = 50$  meV.  $T_c(\mathbf{K})$  transmitancia en términos de  $\mathbf{K}$ .  $T_c(\mathbf{H}) / T_c(\mathbf{S})$  transmitancia en términos de  $\mathbf{H}/\mathbf{S}$ .  $|\text{Det}[\mathbf{K}]| / |\text{Det}[\mathbf{H}]|$  módulo del determinante de la matriz  $\mathbf{K}/\mathbf{H}$ .

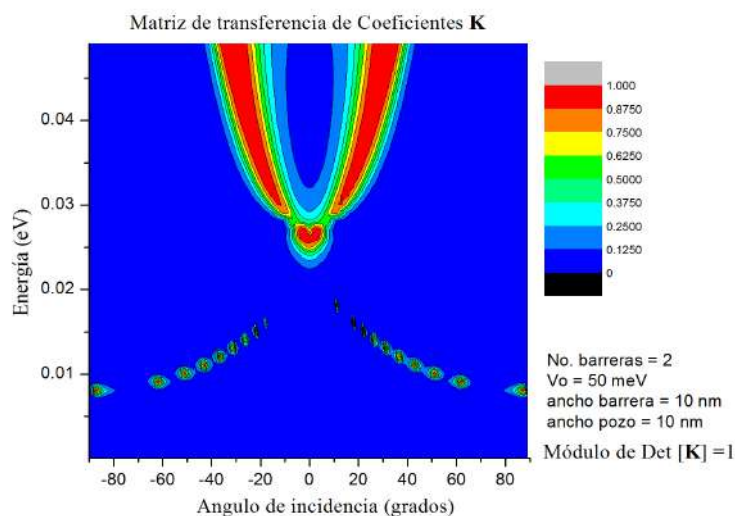


Figura 5.23: Diagrama de contorno ( $E, \varphi_0$ ) en términos de **K** para un sistema de dos barreras en DCG. La escala de colores indica valores de Transmitancia. Altura de las barreras  $V_0 = 50$  meV;  $d_b = d_w = 10$  nm. El módulo del determinante ( $|\text{Det} [\mathbf{K}]| = 1$ ) como predice el cálculo algebraico.

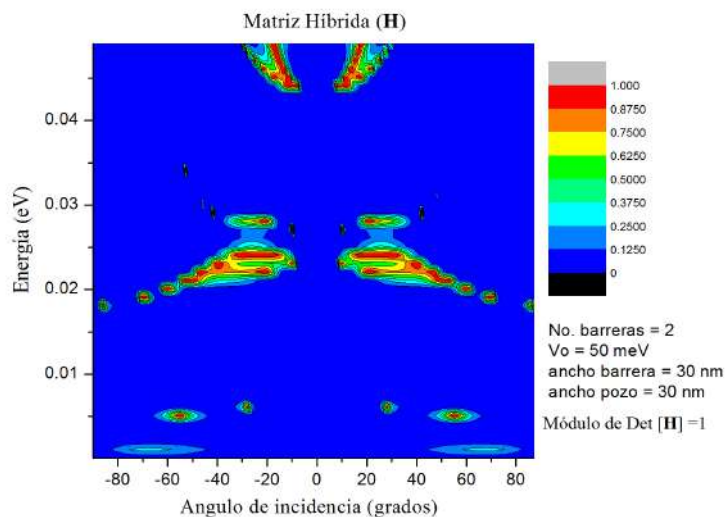


Figura 5.24: Diagrama de contorno ( $E, \varphi_0$ ) en términos de **H** para un sistema de dos barreras en DCG. La escala de colores indica valores de Transmitancia. Altura de las barreras  $V_0 = 50$  meV;  $d_b = d_w = 30$  nm. El módulo del determinante ( $|\text{Det} [\mathbf{H}]| = 1$ ).



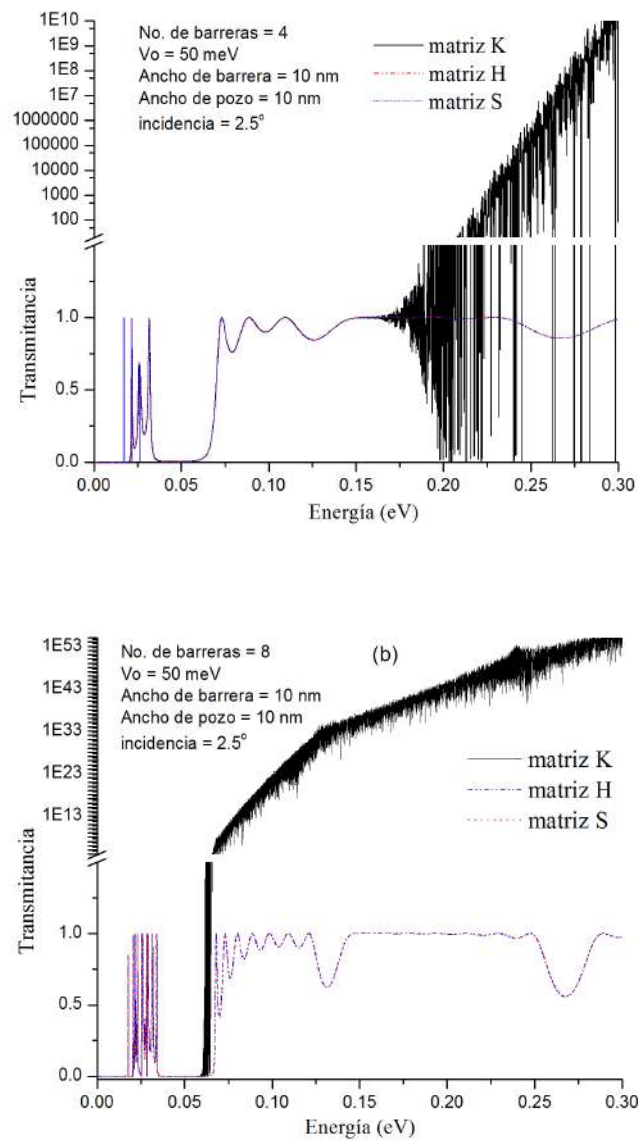


Figura 5.25: Transmitancia como función de la energía de los electrones incidentes ( $E$ ) para anchos  $d_b = d_w = 10$  nm;  $V_0 = 50$  meV y ángulo de incidencia  $\varphi_0 = 2.5^\circ$ . (a) sistema de 4 barreras de potencial. (b) sistema de 8 barreras de potencial.

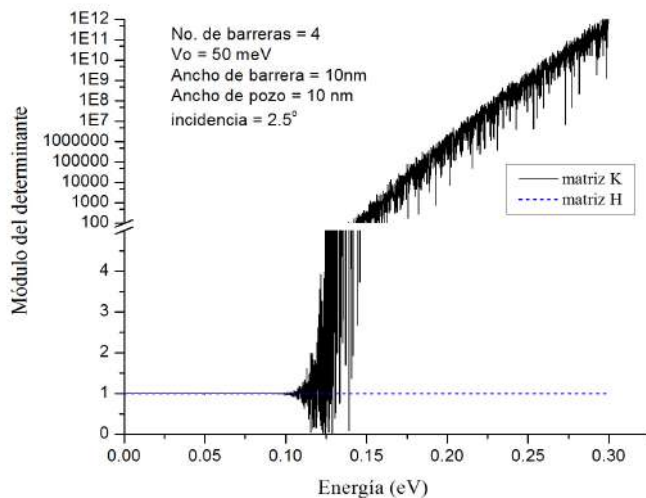


Figura 5.26: Módulo del determinante de las matrices  $\mathbf{K}$  y  $\mathbf{H}$  como función de la energía de los electrones incidentes ( $E$ ) para sistema de cuatro barreras de potencial; anchos  $d_b = d_w = 10$  nm;  $V_0 = 50$  meV y ángulo de incidencia  $\varphi_0 = 2.5^\circ$ .

### Comportamiento de la estabilidad numérica de $\mathbf{K}$ con el incremento de la altura de las barreras

Se analiza el efecto que produce el incremento de la altura de las barreras en la estabilidad numérica de  $\mathbf{K}$ . Para ello se estudió el sistema de cuatro barreras con  $d_b = d_w = 10$  nm para el ángulo de incidencia  $\varphi_0 = 2.5^\circ$ . Las alturas de barreras a considerar fueron  $V_0 = 50$  meV y  $V_0 = 100$  meV. La transmitancia como función de la energía para ambos casos se muestra en la figura 5.27. Se observa que con el incremento de la altura de las barreras hay un desplazamiento de las resonancias a energías mayores y en general ocurre una disminución en la transmitancia. En este caso se aprecia una ligera reducción de la región de energías donde se manifiesta la inestabilidad numérica: energías superiores a 0.1515 meV para  $V_0 = 50$  meV y energías superiores a 0.1835 meV para  $V_0 = 100$  meV.

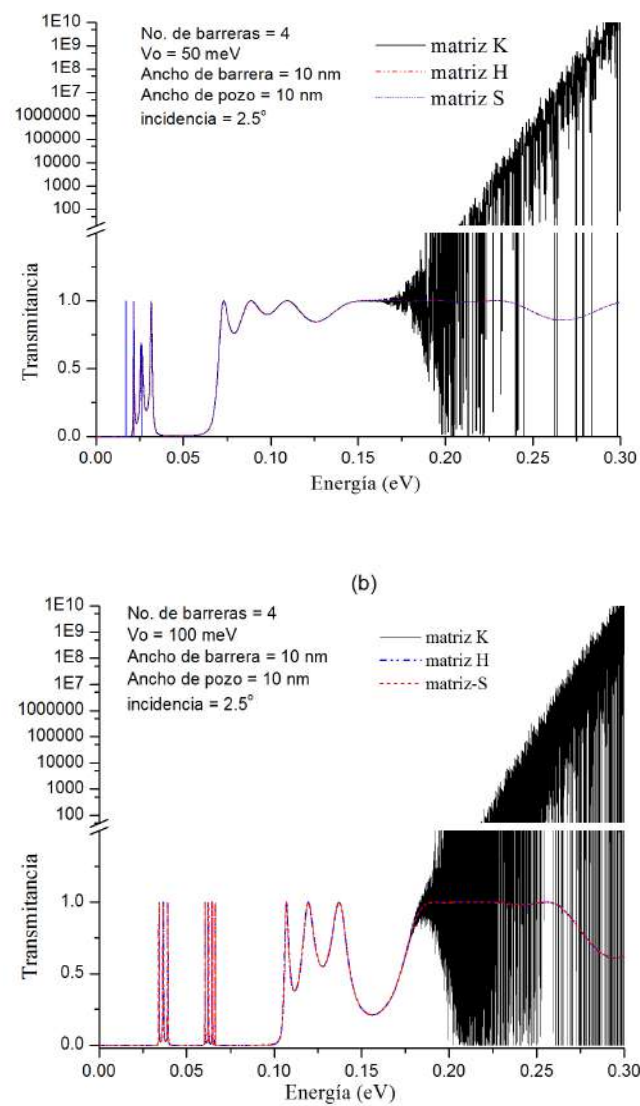


Figura 5.27: Transmitancia como función de la energía de los electrones incidentes ( $E$ ) para un sistema de cuatro barreras con  $d_b = d_w = 10$  nm; ángulo de incidencia  $\varphi_0 = 2.5^\circ$ . (a)  $V_0 = 50$  meV. (b)  $V_0 = 100$  meV.

# Capítulo 6

## Conclusiones y recomendaciones

### 6.1 Conclusiones

A continuación un compendio general de los aspectos conclusivos relativos a las dos herramientas tratadas en este trabajo: El método de la función de Green y el método de la matriz de transferencia:

- Se obtuvo una forma general y compacta de la función de Green para la ecuación Sturm-Liouville matricial del medio homogéneo con condiciones de regularidad en el infinito así como una ecuación algebraica para verificar su validez. La expresión es aplicable para cualquier número de ecuaciones diferenciales acopladas involucradas en la Ecuación Sturm-Liouville Matricial en el caso común en que los polos de la función de Green son de primer orden.
- El análisis realizado a los elementos de la matriz de transferencia asociada  $\mathbf{T}$ , derivada de la Ecuación Sturm-Liouville Matricial (ESLM) general para un medio homogéneo, indica que las aplicaciones numéricas de dicha matriz estarán expuestas a la ocurrencia de una degradación numérica conocida como problema  $\Omega-d$  cuyo origen son los errores asociados a las operaciones de redondeo que realizan los equipos de cómputo. Las expresiones de dichos elementos matriciales indican que el problema  $\Omega-d$  es más probable cuando los eigenvalores del operador  $\mathbf{L}$  son complejos. En dicho caso los elementos matriciales de  $\mathbf{T}$  se caracterizan por presentar sumas que involucran funciones exponenciales de argumento real positivo con funciones exponenciales de argumento real negativo. Estas sumas terminan siendo redondeadas cuando el argumento de dichas funciones crece lo suficiente, originando el problema  $\Omega-d$ . Para cada eigenvalor el mencionado argumento consiste en el producto de su parte imaginaria con el espesor del dominio analizado, de ahí que el problema  $\Omega-d$  tienda a reportarse con el incremento del espesor de las capas que conforman la heteroestructura (o el número de estas) y/o con el incremento de algún parámetro contenido en la parte imaginaria del eigenvalor, por ejemplo, la frecuencia de los modos cuando se estudian ondas elásticas.
- Para eigenvalores complejos todo elemento de la matriz  $\mathbf{T}$  crece indefinidamente si así lo hace el argumento real de las funciones exponenciales que lo componen. Esta característica puede impedir el cálculo de  $\mathbf{T}$  por desbordamiento aritmético del equipo de cómputo, revelando otra debilidad numérica de esta matriz.
- Mediante el análisis de las relaciones entre matrices se comprobó analíticamente que existen variantes del método de la matriz de transferencia asociada con la capacidad para evadir el problema  $\Omega-d$ . Las variantes analizadas fueron: la matriz híbrida ( $\mathbf{H}$ ), la matriz rigidez  $\mathbf{E}$  y sus respectivas inversas, así como la matriz de dispersión ( $\mathbf{S}$ ). Estas variantes se caracterizan porque sus dimensiones dependen del número de ecuaciones que componen el sistema Sturm-Liouville Matricial y no del número de capas de la heteroestructura, como es el caso de la matriz Global, utilizada con frecuencia como alternativa para evadir el problema  $\Omega-d$ . Con la técnica desarrollada se pudo comprender

porqué estas variantes pueden evadir el problema  $\Omega - d$  aun cuando sus elementos matriciales pueden ser objeto de redondeos.

- Se estableció la formulación de algunos problemas de contorno típicos en términos de las matrices numéricamente estables analizadas. Por su carácter general estas formulaciones son aplicables a todo problema físico cuyas ecuaciones de movimiento sean casos particulares de la ESLM.
- Se resolvieron distintos problemas físicos de interés actual en sistemas a capas que permitieron verificar que las matrices propuestas se comportan de forma numéricamente estable y conducen a resultados correctos en casos en que la matriz  $\mathbf{T}$  manifiesta el problema  $\Omega - d$ . En algunos ejemplos se pudo comprobar que el procedimiento para determinar estas matrices, cuyas dimensiones no dependen del número de capas de la heteroestructura, resultó mucho más sencillo en comparación con el método de la matriz global cuyo orden depende del número de capas de la heteroestructura.

De acuerdo con los objetivos específicos planteados se obtuvieron un conjunto de resultados de cuya evaluación se presentan a continuación las siguientes conclusiones:

La técnica de análisis de la estabilidad numérica basada en las relaciones entre matrices de transferencia permitió determinar que:

- La matriz Híbrida puede evadir el problema  $\Omega - d$  y converger establemente a valores finitos sin importar cuan grandes o pequeños sean los espesores en la heteroestructura y con independencia del número de capas que la compongan. Para una ESLM dada, el resultado es el mismo con independencia de la base de eigenfunciones utilizada para construir la matriz. El resultado es el mismo para su matriz inversa.
- Para un sistema  $L - M - R$  la matriz de dispersión  $\mathbf{S}(R; L)$  que se obtuvo a partir de su relación con la matriz Híbrida correspondiente a la región intermedia (M) puede evadir el problema  $\Omega - d$  y converger establemente a valores finitos sin importar cuan grandes o pequeños sean los espesores que encontremos en (M) y con independencia de la base reducida utilizada en los dominios externos L y R.
- Tanto la matriz de rigidez  $\mathbf{E}$  como su inversa, la matriz de admitancia  $\mathbf{L}_c$  serán computacionalmente estables y podrán evadir el problema  $\Omega - d$  para grandes espesores de las capas que componen la heteroestructura, con independencia del número de estas. Sin embargo, cuando estos espesores tienden a ser muy pequeños la acumulación de los errores por redondeo pueden conducir al problema  $\Omega - d$  o a una singularidad numérica. Para una ESLM dada, el resultado es el mismo con independencia de la base de eigenfunciones utilizada para construir dichas matrices.
- La matriz de transferencia de coeficientes ( $\mathbf{K}$ ) y la matriz de transferencia completa ( $\mathbf{M}$ ) son vulnerables a las inestabilidades numéricas que se manifiestan en la matriz  $\mathbf{T}$ .

Utilizando el método estándar de la transformada de Fourier y como técnica de integración el método de residuos, en particular el lema de Jordan, se obtuvo una forma general y compacta para la función de Green del operador Sturm-Liouville Matricial homogéneo con condiciones de regularidad en el infinito. El estudio del QEP correspondiente a diferentes casos particulares de la ESLM indica que:

- La formación de pares del tipo  $(k_\ell, -k_\ell)$  es una situación común aun cuando el término lineal de la ecuación no es nulo (casos  $\mathbf{P} + \mathbf{Y} \neq \mathbf{0}$ ). Teniendo en cuenta esta característica se obtuvieron dos expresiones particulares de la forma general y compacta de la función de Green, una para los casos  $\mathbf{P} + \mathbf{Y} = \mathbf{0}$  y otra para  $\mathbf{P} + \mathbf{Y} \neq \mathbf{0}$ . Ambas expresiones fueron aplicadas a diferentes problemas comprobándose su validez incluso en los casos en que no fue posible obtener expresiones analíticas para los eigenvalores.
- Se demostró que una condición necesaria para que los eigenvalores formen pares del tipo  $(k_\ell, -k_\ell)$  es que la matriz  $i(\mathbf{P} + \mathbf{Y})$  sea indefinida, condición que se cumple incluso para el modelo de

aproximación de la función envolvente de  $N$  bandas. En medios elásticos y piezoeléctricos el análisis de las propiedades del problema cuadrático de eigenvalores indica una relación entre la formación de pares del tipo  $(k_\ell, -k_\ell)$  y la simetría del cristal del cual está compuesto el medio. Para el cristal triclinico, en general no se forman los mencionados pares, pero estos si aparecen en cristales con mayor simetría como el caso ortogonal, tetragonal, transversalmente isotrópico, cúbico e isotrópico, donde el número de componentes independientes de los tensores involucrados en la ESLM es menor a medida que el cristal es más simétrico.

Los problemas físicos estudiados constituyen ejemplos concretos del amplio espectro de excitaciones elementales que pueden estudiarse en distintos sistemas a capas utilizando una formulación de problemas de contorno típicos, en términos de las matrices numéricamente estables que estudiamos. Se estudiaron cuatro problemas físicos. La capacidad de las matrices utilizadas para evadir el problema  $\Omega - d$  quedó demostrada:

- Mediante el método de la matriz híbrida se calcularon curvas de dispersión de velocidades superficiales de ondas SH como función de la frecuencia para sistemas piezoeléctricos multicapas. Los sistemas tratados se componen de dos tipos de material piezoeléctrico frecuentemente empleados en las aplicaciones prácticas. Dichas curvas tienen como fin analizar la velocidad de propagación de los distintos modos de vibración que se presentan en estas heteroestructuras. El cálculo ya había sido reportado utilizando el método de la matriz global (MMG) como técnica para evadir los problemas de estabilidad numérica manifestados por el método estándar de la matriz de transferencia. Nuestro análisis se enfocó en los sistemas de tres y nueve capas para los que la matriz global utilizada es de orden  $8 \times 8$  y  $32 \times 32$  respectivamente. Utilizando nuestra formulación se comprobó que el incremento de la frecuencia de los modos afecta la estabilidad numérica de la matriz de transferencia asociada. Para todo el espectro de frecuencias analizado, se comprobó que los cálculos realizados con matrices híbridas de orden  $4 \times 4$  reproducen un resultado cualitativo característico de los sistemas analizados, se trata de la formación de dos bandas en las curvas de dispersión, una de modos pares y otra de modos impares. Desde el punto de vista cuantitativo, la notable similitud entre valores de velocidad calculados para diferentes frecuencias utilizando el MMG y el método de  $\mathbf{H}$ , confirma la capacidad de este último para evadir el problema  $\Omega - d$  con menos requerimientos formales y de cómputo en comparación con el MMG.
- Mediante el método de la matriz híbrida y el método de la matriz de dispersión se determinaron los segmentos de bandas prohibidas correspondientes a espectros de transmitancia de ondas elásticas que se propagan en cristales fonónicos unidimensionales ordenados, y en cristales fonónicos aleatoriamente desordenados. Para una onda que incide  $40^\circ$  respecto a la normal a las intercaras de un cristal fonónico periódico, compuesto de 36 capas, se comprobó que los espectros obtenidos por ambos métodos (matrices de orden  $4 \times 4$ ) coinciden con el espectro calculado mediante una matriz global construida para dicho problema (de orden  $144 \times 148$ ). El análisis de la matriz de transferencia asociada indica que su estabilidad numérica se afecta con el incremento del ángulo de incidencia, la frecuencia de los modos y el número de capas del sistema. Para un ángulo de incidencia de  $40^\circ$  se observó el comportamiento inestable en la matriz  $\mathbf{T}$  al incrementar el número de capas del cristal a pesar de que para esta incidencia los eigenvalores del operador  $\mathbf{L}$  son reales. En todo el intervalo de frecuencias y ángulos de incidencia analizado, la matriz  $\mathbf{H}$  y la matriz  $\mathbf{S}$  mostraron estabilidad numérica. Los segmentos de bandas prohibidas fueron determinados también mediante el cálculo del Factor de localización en términos de la matriz de transferencia asociada y en términos de la matriz de dispersión. En este último caso, el cálculo requirió menos iteraciones para obtener los mismos resultados que con  $\mathbf{T}$ . Se comprobó que debido a la inestabilidad numérica de la matriz  $\mathbf{T}$ , los intervalos de bandas prohibidas determinados a partir de los espectros de transmitancia pueden no coincidir con los predichos por el Factor de Localización.
- Para el estudio de la propagación de ondas electromagnéticas en sistemas a capas compuestos de materiales anisotrópicos lineales, se estableció una Ecuación Sturm-Liouville Matricial en términos de las componentes tangenciales del campo eléctrico. Dicha ecuación considera las pérdidas óhmicas

y es apropiada para construir matrices de transferencia de orden  $4 \times 4$  en heteroestructuras donde los tensores: permitividad, permeabilidad magnética y conductividad eléctrica dependen de la coordenada perpendicular a las intercaras pero son constantes por tramos.

Se calculó el espectro de reflectancia para la estructura de una microcavidad Fabry-Pérot compuesta de capas de Silicio mesoporoso que exhibe birrefringencia óptica. Para esta estructura anisotrópica se consideró la absorción del Silicio poroso y la matriz  $\mathbf{T}$  resultó de orden  $2 \times 2$ . La excelente correspondencia entre el espectro calculado y el experimental reportado en la literatura confirma que la ESLM establecida constituye un método apropiado para el estudio de la propagación de las OEM en heteroestructuras anisotrópicas a capas.

Se calculó también el espectro de reflectancia para un espejo fotónico de Silicio poroso (sistema isotrópico a capas) utilizando una matriz híbrida y una matriz  $\mathbf{T}$  y se verificó que esta última si manifiesta inestabilidad numérica a altas frecuencias (bajas longitudes de onda) donde la absorción del Silicio poroso es fuerte. No obstante se demostró que en este problema isotrópico el coeficiente de reflexión puede ser calculado utilizando una expresión que permite cancelar los errores de redondeo que afectan los elementos matriciales de  $\mathbf{T}$  y de esta forma es posible obtener coeficientes tan exactos como los obtenidos con la matriz híbrida.

- Se comprobó que el cálculo de propiedades de transmisión en sistemas de múltiples barreras de potencial electrostático en doble capa de Grafeno no es afectado por el problema  $\Omega - d$  cuando se emplea el método de la matriz híbrida y el método de la matriz de dispersión. A diferencia de la matriz de transferencia de coeficientes que suele utilizarse en dichos cálculos, las primeras mostraron un comportamiento numérico estable al variar la configuración del sistema: número y altura de barreras, ancho de pozos y de barreras, intervalo de energía de los electrones y ángulo de incidencia. A partir de matrices  $\mathbf{H}$  y  $\mathbf{S}$  se reprodujeron espectros de resonancia fano reportados para doble barrera a incidencia cercana a la normal.

Estos resultados indican que los métodos de matrices de transferencia numéricamente estables, estudiados en esta tesis, constituyen una importante herramienta de cálculo no solo para la caracterización de heteroestructuras, sino también para el diseño de las mismas. Dada la estabilidad numérica de dichos métodos y la variedad de problemas de contorno que pueden tratarse con estos, estas herramientas pueden ser utilizadas por grupos de trabajo experimental o teórico que durante el diseño de un sistema a capas deseen variar parámetros tales como número de capas, altura de barreras, frecuencias, etc. y determinar de forma correcta los cambios en las propiedades de dicho sistema.

## 6.2 Recomendaciones y Problemas abiertos

Particularmente interesante resulta extender el estudio de las relaciones entre la función de Green y las matrices de transferencia. Por un lado las matrices de transferencia son objetos inherentemente adecuados para el trabajo computacional cuando las soluciones no pueden obtenerse analíticamente y por otro las funciones de Green resultan muy atractivas dado que contienen en sí mismas la información física del problema que se estudia. La relación entre  $\mathbf{G}(z, z')$  y la matriz de transferencia asociada  $\mathbf{T}$  está bien estudiada en [8]. Sin embargo la relación con matrices numéricamente estables como la híbrida o la matriz de dispersión no ha sido desarrollada. De ahí que resulta motivante el desarrollo futuro de este tema.

Entre los problemas tratados en este trabajo se encuentran la propagación de ondas electromagnéticas en medio isotrópico conductor y la propagación de ondas elásticas en medios viscosos. En ambos casos se consideran las pérdidas del medio. Los ejemplos ilustran que aun cuando no se cumplen las condiciones que garantizan la hermiticidad formal del operador Sturm-Liouville  $\mathbf{L}$ , se pueden aplicar las mismas técnicas de matrices de transferencia que en casos donde esta propiedad se cumple e incluso obtener expresiones para la función de Green de la Ecuación Sturm-Liouville Matricial en el medio homogéneo. No obstante, no se ha realizado un estudio formal más general que contemple la inclusión de las pérdidas del medio en la ESLM y sus consecuencias en las propiedades del operador  $\mathbf{L}$  y sus eigenvalores. Por tanto aquí se tiene otro tema a desarrollar.

## Apéndice A

# Obtención de la forma general y compacta de la función de Green

En el medio homogéneo la ecuación para la función de Green es (2.6):

$$\mathbf{B} \cdot \mathbf{G}(z, z') + (\mathbf{P} + \mathbf{Y}) \cdot \mathbf{G}(z, z') + \mathbf{W} \cdot \mathbf{G}(z, z') = \mathbf{I} \delta(z - z'). \quad (\text{A.1})$$

Esta expresión Fourier transformada se escribiría así:

$$[-(k)^2 \mathbf{B} + ik(\mathbf{P} + \mathbf{Y}) + \mathbf{W}] \cdot \mathbf{G}(k, z') = \mathbf{I}_N \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikz'}, \quad (\text{A.2})$$

de donde obtenemos que:

$$\mathbf{G}(k, z') = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikz'} [-(k)^2 \mathbf{B} + ik(\mathbf{P} + \mathbf{Y}) + \mathbf{W}]^{-1}. \quad (\text{A.3})$$

La  $\mathbf{G}(z, z')$  buscada se puede hallar haciendo la antitransformada. Esto es:

$$\mathbf{G}(z, z') = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{G}(k, z') e^{ikz} dk. \quad (\text{A.4})$$

Sustituyendo la expresión obtenida para  $\mathbf{G}(k, z')$ , se llega a que:

$$\mathbf{G}(z, z') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} [-(k)^2 \mathbf{B} + ik(\mathbf{P} + \mathbf{Y}) + \mathbf{W}]^{-1} e^{ik(z-z')} dk \quad (\text{A.5})$$

Definiendo:

$$\mathbf{\Delta}(k) = -k^2 \mathbf{B} + ik(\mathbf{P} + \mathbf{Y}) + \mathbf{W}, \quad (\text{A.6})$$

y teniendo en cuenta la expresión (2.16):

$$\mathbf{\Delta}(k)^{-1} = \frac{\mathbf{C}_o^T(k)}{\text{Det} [\mathbf{\Delta}(k)]}, \quad (\text{A.7})$$

tendremos que:

$$\mathbf{G}(z, z') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathbf{C}_o^T(k)}{\text{Det} [\mathbf{\Delta}(k)]} e^{ik(z-z')} dk, \quad (\text{A.8})$$



## Cálculo de la integral aplicando técnicas de residuos y el lema de Jordan

El cálculo de la integral (A.8) es relativamente sencillo si se aplican los resultados de la teoría de residuos y particularmente el Lema de Jordan [45], en cuyo caso necesitamos conocer los polos de la función de Green, es decir los valores  $k_\ell$  que satisfacen la ecuación  $\text{Det} [\Delta(k)] = 0$ . Es decir se deben conocer los eigenvalores del QEP, ver sección 2.2. El resultado es:

$$\mathbf{G}(z, z') = \begin{cases} +i \sum_{k_\ell \in K_\uparrow} \text{Res} \left[ \frac{\mathbf{C}_o^T(k)}{\text{Det} [\Delta(k)]} e^{ik(z-z')}, k_\ell \right] & z > z' \\ -i \sum_{k_\ell \in K_\downarrow} \text{Res} \left[ \frac{\mathbf{C}_o^T(k)}{\text{Det} [\Delta(k)]} e^{ik(z-z')}, k_\ell \right] & z < z' . \end{cases} \quad (\text{A.9})$$

Aplicando técnicas de cálculo conocidas, las sumas de residuos (Res) planteadas arriba resultan:

$$+i \sum_{k_\ell \in K_\uparrow} \text{Res} \left[ \frac{\mathbf{C}_o^T(k)}{\text{Det} [\Delta(k)]} e^{ik(z-z')}, k_\ell \right] = +i \sum_{k_\ell \in K_\uparrow} \frac{\mathbf{C}_o^T(k_\ell)}{D'(k_\ell)} e^{ik_\ell(z-z')} \quad z > z'; \quad (\text{A.10})$$

$$-i \sum_{k_\ell \in K_\downarrow} \text{Res} \left[ \frac{\mathbf{C}_o^T(k)}{\text{Det} [\Delta(k)]} e^{ik(z-z')}, k_\ell \right] = -i \sum_{k_\ell \in K_\downarrow} \frac{\mathbf{C}_o^T(k_\ell)}{D'(k_\ell)} e^{ik_\ell(z-z')} \quad z < z' , \quad (\text{A.11})$$

donde

$$D'(k) = \frac{d}{dk} (\text{Det} [\Delta(k)]). \quad (\text{A.12})$$

Por tanto:

$$\mathbf{G}(z, z') = \begin{cases} \sum_{k_\ell \in K_\uparrow} \mathbf{g}_\ell e^{ik_\ell(z-z')} & z > z' \\ -\sum_{k_\ell \in K_\downarrow} \mathbf{g}_\ell e^{ik_\ell(z-z')} & z < z' ; \end{cases} \quad (\text{A.13})$$

$$\mathbf{g}_\ell = i \frac{\mathbf{C}_o^T(k_\ell)}{D'(k_\ell)} .$$

Esta expresión puede ser escrita así:

$$\mathbf{G}(z, z') = \begin{cases} \sum_{k_\ell \in K_\uparrow} \mathbf{g}_\ell e^{ik_\ell|z-z'|} & z > z' \\ -\sum_{k_\ell \in K_\downarrow} \mathbf{g}_\ell e^{-ik_\ell|z-z'|} & z < z' , \end{cases} \quad (\text{A.14})$$

## Apéndice B

# Modelo Fenomenológico Completo (MFC). Ecuación de movimiento

El modelo fenomenológico en aproximación de onda larga para fonones ópticos polares en heteroestructuras semiconductoras describe el acoplamiento entre la amplitud de vibración  $\vec{u} = (u_x, u_y, u_z)^T$  de los modos ópticos polares y el potencial electrostático  $\varphi$ . El sistema original de ecuaciones de movimiento del modelo considera parámetros fenomenológicos dependientes de la posición. Para un medio isotrópico se tiene que [2]:

$$\rho(\omega^2 - \omega_T^2)\vec{u}(\vec{r}) = \nabla \cdot (\rho\beta_L^2 \nabla \vec{u}) - \nabla \times (\rho\beta_T^2 \nabla \times \vec{u}) + \alpha \nabla \varphi; \quad (\text{B.1})$$

$$\nabla \cdot (\epsilon_\infty \nabla \varphi) = 4\pi \nabla \cdot (\alpha \vec{u}); \quad (\text{B.2})$$

$\omega_T$  denota la frecuencia del modo óptico transversal en el punto  $\Gamma$  de la zona de Brillouin. Los parámetros  $\beta_L$ ,  $\beta_T$  caracterizan la parabolicidad de las ramas ópticas del espectro de fonones en la vecindad del punto  $\Gamma$ ,  $\epsilon_\infty$  es la constante dieléctrica a alta frecuencia,  $\rho$  es la densidad de masa reducida. Dada la simetría cúbica de los materiales que considera el modelo, el tensor  $\hat{\alpha}$  que describe el acoplamiento entre el vector de vibración  $\vec{u}$  y el campo eléctrico toma una forma diagonal simple  $\hat{\alpha} = \alpha \mathbf{I}$  con  $\alpha$  expresado en términos de  $\epsilon_\infty$ ,  $\rho$ ,  $\omega_T$  y la constante dieléctrica estática  $\epsilon_0$  [2].

En lo adelante se supondrá que los parámetros fenomenológicos son constantes en cada dominio de la heteroestructura, pudiendo tomar valores diferentes en cada dominio. La transformada de Fourier del primer grupo de ecuaciones (B.1) conduce a:

$$\begin{aligned} \rho(\beta_L^2 + \beta_T^2) \frac{d^2 u_x}{dz^2} - \rho[\beta_L^2 k_x^2 + (\beta_L^2 + \beta_T^2) k_y^2 + (\omega^2 - \omega_T^2)] u_x - \\ - \rho\beta_T^2 i k_x \frac{du_z}{dz} + \rho\beta_T^2 k_x k_y u_y + i\alpha k_x \varphi = 0; \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

$$\begin{aligned} \rho(\beta_L^2 + \beta_T^2) \frac{d^2 u_y}{dz^2} - \rho[\beta_L^2 k_y^2 + (\beta_L^2 + \beta_T^2) k_x^2 + (\omega^2 - \omega_T^2)] u_y - \\ - \rho\beta_T^2 i k_y \frac{du_z}{dz} + \rho\beta_T^2 k_x k_y u_x + i\alpha k_y \varphi = 0; \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

$$\begin{aligned} \rho\beta_L^2 \frac{d^2 u_z}{dz^2} - \rho[(\beta_L^2 + \beta_T^2)(k_x^2 + k_y^2) + (\omega^2 - \omega_T^2)]u_z - \\ - \rho\beta_T^2 i k_x \frac{du_x}{dz} - \rho\beta_T^2 i k_y \frac{du_y}{dz} + \alpha \frac{d\varphi}{dz} = 0. \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

La transformada de Fourier la ecuación (B.2) conduce a:

$$\frac{\epsilon_\infty}{4\pi} \frac{d^2 \varphi}{dz^2} - \frac{\epsilon_\infty}{4\pi} (k_x^2 + k_y^2) \varphi - \alpha \frac{du_z}{dz} - \alpha i k_x u_x - \alpha i k_y u_y = 0. \quad (\text{B.6})$$

Se debe tener presente que cada vez que transformemos una ecuación se tendrá que  $u_x = u_x(z)$ ,  $u_y = u_y(z)$ ,  $u_z = u_z(z)$  y  $\varphi = \varphi(z)$ .

### Validación de la función de Green del MFC

El cumplimiento de (2.33) puede verificarse haciendo uso de la matriz  $\mathbf{C}_o^{T(par)}$  cuyos elementos son:

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_o^{T(par)}(k_\ell)_{11} &= \frac{1}{4\pi} \left\{ -4\pi k_\ell^2 \alpha^2 + (\kappa_y^2 + k_\ell^2) \epsilon_\infty \rho [k_\ell^2 \beta_L^2 + \kappa_y^2 (\beta_L^2 + \beta_T^2) + \omega^2 - \omega_T^2] \right\}; \\ \mathbf{C}_o^{T(par)}(k_\ell)_{12} &= 0; \\ \mathbf{C}_o^{T(par)}(k_\ell)_{13} &= i \kappa_y \alpha \rho [(\kappa_y^2 + k_\ell^2) (\beta_L^2 + \beta_T^2) + (\omega^2 - \omega_T^2)]; \\ \mathbf{C}_o^{T(par)}(k_\ell)_{21} &= 0; \\ \mathbf{C}_o^{T(par)}(k_\ell)_{22} &= \frac{\epsilon_\infty \rho}{4\pi} \left\{ \kappa_y^4 \beta_L^2 + k_\ell^2 [k_\ell^2 (\beta_L^2 + \beta_T^2) + \omega^2 - \omega_T^2] + \kappa_y^2 \left[ \frac{-4\pi \alpha^2}{\epsilon_\infty \rho} + (k_\ell^2 (2\beta_L^2 + \beta_T^2) + \omega^2 - \omega_T^2) \right] \right\}; \\ \mathbf{C}_o^{T(par)}(k_\ell)_{23} &= \omega^2 - \omega_T^2; \\ \mathbf{C}_o^{T(par)}(k_\ell)_{31} &= -\mathbf{C}_o^{T(par)}(k_\ell)_{13}; \\ \mathbf{C}_o^{T(par)}(k_\ell)_{32} &= \mathbf{C}_o^{T(par)}(k_\ell)_{23}; \\ \mathbf{C}_o^{T(par)}(k_\ell)_{33} &= \rho^2 [(\kappa_y^2 + k_\ell^2) \beta_L^2 + \omega^2 - \omega_T^2] [(\kappa_y^2 + k_\ell^2) (\beta_L^2 + \beta_T^2) + \omega^2 - \omega_T^2], \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

y de las expresiones:

$$D'(k_1) = -\frac{k_1 \rho}{2\pi} (\omega_T^2 - \omega^2) [4\pi \alpha^2 + \epsilon_\infty \rho (\omega_T^2 - \omega^2)]; \quad (\text{B.8})$$

$$D'(k_3) = \frac{\rho}{2\pi} (\omega_T^2 - \omega^2) k_3 \left[ 4\pi \alpha^2 + \beta_T^2 \epsilon_\infty \rho \frac{\omega_T^2 - \omega^2}{\beta_L^2 + \beta_T^2} \right]; \quad (\text{B.9})$$

$$D'(k_5) = -\frac{\epsilon_\infty \rho^2}{2\pi \beta_L^2} k_5 \left[ \frac{4\pi \alpha^2}{\epsilon_\infty \rho} + (\omega_T^2 - \omega^2) \right] \left[ \frac{4\pi \alpha^2}{\epsilon_\infty \rho} (\beta_L^2 + \beta_T^2) + \beta_T^2 (\omega_T^2 - \omega^2) \right]. \quad (\text{B.10})$$

Los eigenvalores  $k_1$ ,  $k_3$  y  $k_5$  vienen dados por las expresiones:

$$k_1 = i\kappa_y; \quad (\text{B.11})$$

$$k_3 = \sqrt{\frac{\omega_T^2 - \omega^2}{\beta_L^2 + \beta_T^2} - \kappa_y^2}; \quad (\text{B.12})$$

$$k_5 = \frac{1}{\beta_L} \sqrt{\frac{4\pi\alpha^2}{\epsilon_\infty\rho} - \kappa_y^2\beta_L^2 + (\omega_T^2 - \omega^2)}. \quad (\text{B.13})$$

## Apéndice C

# Ecuación de la onda elástica en un cristal ortotrópico

La ecuación de la onda elástica en un sólido homogéneo es el resultado de la segunda ley de Newton y de la ley de Hooke [41]:

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = c_{ijkl} \frac{\partial^2 u_l}{\partial x_j \partial x_k} ; (i, j, k, l) = 1, 2, 3 . \quad (\text{C.1})$$

Aquí  $u_1$ ,  $u_2$  y  $u_3$  son las componentes del desplazamiento de un punto arbitrario en el sólido;  $c_{ijkl}$  son las componentes del tensor de rigidez (constantes elásticas) y  $\rho$  la densidad de masa del material. Se trata de un sistema de tres ecuaciones diferenciales de segundo orden acopladas. Escribiremos estas ecuaciones para el caso de un medio orthotrópico donde [41]:

$$c_{ijkl} \Leftrightarrow c_{\alpha\beta} = \begin{vmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{22} & c_{23} & 0 & 0 & 0 \\ c_{13} & c_{23} & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{66} \end{vmatrix} . \quad (\text{C.2})$$

La relación entre subíndices  $\alpha \leftrightarrow (ij)$  y  $\beta \leftrightarrow (kl)$  se explica en el apéndice L. Teniendo en cuenta las componentes del tensor  $c_{ijkl}$  que no se anulan, la expansión del sistema de ecuaciones (C.1) resulta:

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial^2 u_1}{\partial t^2} &= c_{11} \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1^2} + c_{12} \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_1 \partial x_2} + c_{13} \frac{\partial^2 u_3}{\partial x_1 \partial x_3} + c_{66} \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_2 \partial x_1} \\ &+ c_{66} \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_2^2} + c_{55} \frac{\partial^2 u_3}{\partial x_3 \partial x_1} + c_{55} \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_3^2} \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial^2 u_2}{\partial t^2} &= c_{66} \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_1^2} + c_{66} \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1 \partial x_2} + c_{12} \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_2 \partial x_1} + c_{22} \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_2^2} \\ &+ c_{23} \frac{\partial^2 u_3}{\partial x_2 \partial x_3} + c_{44} \frac{\partial^2 u_3}{\partial x_3 \partial x_2} + c_{44} \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_3^2} \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial^2 u_3}{\partial t^2} = & c_{55} \frac{\partial^2 u_3}{\partial x_1^2} + c_{55} \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1 \partial x_3} + c_{44} \frac{\partial^2 u_3}{\partial x_2^2} + c_{44} \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_2 \partial x_3} \\ & + c_{13} \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_3 \partial x_1} + c_{23} \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_3 \partial x_2} + c_{33} \frac{\partial^2 u_3}{\partial x_3^2} \end{aligned} \quad (\text{C.5})$$

Utilicemos la notación  $u_x, u_y, u_z$  en lugar de  $u_1, u_2, u_3$  respectivamente y  $x, y, z$  en lugar de  $x_1, x_2, x_3$ . Consideremos un sistema a capas con simetría planar en el que hemos dirigido el eje  $z$  en la dirección perpendicular a las intercaras de dicha heteroestructura. Entonces planteemos las soluciones del sistema (M.3-M.5) en la forma:  $\vec{u}(x, y, z) = \vec{u}(z) e^{i(\kappa_x x + \kappa_y y - \omega t)}$  donde  $\vec{u} = [u_x, u_y, u_z]^T$ . Como resultado se obtiene el siguiente sistema para  $\vec{u}(z)$ :

$$\begin{aligned} c_{55} \frac{d^2 u_x}{dz^2} + i\kappa_x (c_{13} + c_{55}) \frac{du_z}{dz} + (\rho\omega^2 - c_{11}\kappa_x^2 - c_{66}\kappa_y^2) u_x \\ - (c_{12} + c_{66}) \kappa_x \kappa_y u_y = 0, \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

$$\begin{aligned} c_{44} \frac{d^2 u_y}{dz^2} + i\kappa_y (c_{23} + c_{44}) \frac{du_z}{dz} + (\rho\omega^2 - c_{66}\kappa_x^2 - c_{22}\kappa_y^2) u_y \\ - (c_{66} + c_{12}) \kappa_x \kappa_y u_x = 0, \end{aligned} \quad (\text{C.7})$$

$$\begin{aligned} c_{33} \frac{d^2 u_z}{dz^2} + i\kappa_x (c_{55} + c_{13}) \frac{du_x}{dz} + i\kappa_y (c_{44} + c_{23}) \frac{du_y}{dz} \\ + (\rho\omega^2 - c_{55}\kappa_x^2 - c_{44}\kappa_y^2) u_z = 0, \end{aligned} \quad (\text{C.8})$$

## Apéndice D

# Ecuaciones de movimiento en un medio piezoeléctrico

Las ecuaciones de movimiento para la onda piezoeléctrica en un material homogéneo son el resultado de la segunda ley de Newton:

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = c_{ijkl} \frac{\partial^2 u_l}{\partial x_j \partial x_k} + e_{kij} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_j \partial x_k}, \quad (\text{D.1})$$

y de la ecuación de Poisson:

$$e_{jkl} \frac{\partial^2 u_l}{\partial x_j \partial x_k} - \epsilon_{jk} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_j \partial x_k} = 0. \quad (\text{D.2})$$

Estas ecuaciones pueden encontrarse en [41], ver de dicha referencia las ecuaciones (4.67) y (4.69) respectivamente. Los subíndices  $i, j, k, l$  toman los valores 1,2,3.  $u_i$ , representa las componentes del vector desplazamiento  $u_1 = u_x$ ,  $u_2 = u_y$ ,  $u_3 = u_z$ ,  $\phi$  es el potencial eléctrico,  $c_{ijkl}$  son las componentes del tensor de rigidez,  $e_{kij}$  las del tensor piezoeléctrico y  $\epsilon_{jk}$  las componentes del tensor dieléctrico. Por su parte  $\rho$  es la densidad de masa del material. Se trata de un sistema de cuatro ecuaciones diferenciales de segundo orden acopladas.

Dada la simetría de los tensores  $c_{ijkl}$  y  $e_{kij}$ , estos pueden representarse en términos de solo dos subíndices  $c_{\alpha\beta}$  y  $e_{i\alpha}$  respectivamente. Para un sistema ortotrópico clase 2mm, estos tensores resultan [41]:

$$c_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{22} & c_{23} & 0 & 0 & 0 \\ c_{13} & c_{23} & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{66} \end{pmatrix}, \quad (\text{D.3})$$

$$e_{i\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e_{24} & 0 & 0 \\ e_{31} & e_{32} & e_{33} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{D.4})$$

Para el mismo sistema (ortotrópico clase 2mm) tendremos [41]:

$$\epsilon_{jk} = \begin{pmatrix} \epsilon_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_{33} \end{pmatrix}. \quad (\text{D.5})$$

Teniendo en cuenta las componentes de estos tensores que no se anulan, la expansión del sistema de ecuaciones (D.1) resulta:

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2} &= c_{11} \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + c_{12} \frac{\partial^2 u_y}{\partial x \partial y} + c_{13} \frac{\partial^2 u_z}{\partial x \partial z} + c_{66} \frac{\partial^2 u_y}{\partial y \partial x} + c_{66} \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} \\ &\quad + c_{55} \frac{\partial^2 u_z}{\partial z \partial x} + c_{55} \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2} + e_{15} \frac{\partial^2 \phi}{\partial z \partial x} + e_{31} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial z}, \end{aligned} \quad (\text{D.6})$$

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial^2 u_y}{\partial t^2} &= c_{66} \frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} + c_{66} \frac{\partial^2 u_x}{\partial x \partial y} + c_{21} \frac{\partial^2 u_x}{\partial y \partial x} + c_{22} \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} + c_{23} \frac{\partial^2 u_z}{\partial y \partial z} \\ &\quad + c_{44} \frac{\partial^2 u_z}{\partial z \partial y} + c_{44} \frac{\partial^2 u_y}{\partial z^2} + e_{24} \frac{\partial^2 \phi}{\partial z \partial y} + e_{32} \frac{\partial^2 \phi}{\partial y \partial z}, \end{aligned} \quad (\text{D.7})$$

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial^2 u_z}{\partial t^2} &= c_{55} \frac{\partial^2 u_z}{\partial x^2} + c_{55} \frac{\partial^2 u_x}{\partial x \partial z} + c_{44} \frac{\partial^2 u_z}{\partial y^2} + c_{44} \frac{\partial^2 u_y}{\partial y \partial z} + c_{31} \frac{\partial^2 u_x}{\partial z \partial x} \\ &\quad + c_{32} \frac{\partial^2 u_y}{\partial z \partial y} + c_{33} \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} + e_{15} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + e_{24} \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + e_{33} \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2}. \end{aligned} \quad (\text{D.8})$$

Por otra parte la ecuación (D.2) resulta:

$$\begin{aligned} e_{15} \frac{\partial^2 u_z}{\partial x^2} + e_{15} \frac{\partial^2 u_x}{\partial x \partial z} + e_{24} \frac{\partial^2 u_z}{\partial y^2} + e_{24} \frac{\partial^2 u_y}{\partial y \partial z} + e_{31} \frac{\partial^2 u_x}{\partial z \partial x} + e_{32} \frac{\partial^2 u_y}{\partial z \partial y} \\ + e_{33} \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} - \epsilon_{11} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - \epsilon_{22} \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} - \epsilon_{33} \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} = 0. \end{aligned} \quad (\text{D.9})$$

Buscamos soluciones en la forma  $u_i(x, y, z) = u_i(z)e^{(\kappa_x x + \kappa_y y - \omega t)}$ ,  $\phi(x, y, z) = \phi(z)e^{(\kappa_x x + \kappa_y y - \omega t)}$ . Sustituimos estas soluciones en (D.6)-(D.9). Después de acomodar convenientemente los términos se obtiene que:

$$\begin{aligned} c_{55} \frac{d^2 u_x}{dz^2} + i\kappa_x (c_{13} + c_{55}) \frac{du_x}{dz} + i\kappa_x (e_{15} + e_{31}) \frac{d\phi}{dz} \\ + (\rho\omega^2 - c_{11}\kappa_x^2 - c_{66}\kappa_y^2) u_x - (c_{12} + c_{66}) \kappa_x \kappa_y u_y = 0. \end{aligned} \quad (\text{D.10})$$

$$\begin{aligned} c_{44} \frac{d^2 u_y}{dz^2} + i\kappa_y (c_{23} + c_{44}) \frac{du_y}{dz} + i\kappa_y (e_{24} + e_{32}) \frac{d\phi}{dz} \\ + (\rho\omega^2 - c_{66}\kappa_x^2 - c_{22}\kappa_y^2) u_y - (c_{66} + c_{21}) \kappa_x \kappa_y u_x = 0. \end{aligned} \quad (\text{D.11})$$

$$\begin{aligned} c_{33} \frac{d^2 u_z}{dz^2} + e_{33} \frac{d^2 \phi}{dz^2} + i\kappa_x (c_{31} + c_{55}) \frac{du_x}{dz} + i\kappa_y (c_{32} + c_{44}) \frac{du_y}{dz} \\ + (\rho\omega^2 - c_{55}\kappa_x^2 - c_{44}\kappa_y^2) u_z - (e_{15}\kappa_x^2 + e_{24}\kappa_y^2) \phi = 0. \end{aligned} \quad (\text{D.12})$$



$$\begin{aligned}
e_{33} \frac{d^2 u_z}{dz^2} - \epsilon_{33} \frac{d^2 \phi}{dz^2} + i\kappa_x (e_{15} + e_{31}) \frac{du_x}{dz} + i\kappa_y (e_{24} + e_{32}) \frac{du_y}{dz} \\
-(e_{15}\kappa_x^2 + e_{24}\kappa_y^2)u_z + (\epsilon_{11}\kappa_x^2 + \epsilon_{22}\kappa_y^2)\phi = 0.
\end{aligned} \tag{D.13}$$

Aquí  $u_i \equiv u_i(z)$  y  $\phi \equiv \phi(z)$ . En forma Sturm-liouville matricial tendremos la incógnita  $\mathbf{F}(z) = [u_x(z), u_y(z), u_z(z), \phi(z)]^T$ .

Partiendo del sistema de ecuaciones (D.10)-(D.13) se pueden obtener directamente las ecuaciones correspondientes a materiales con mayor simetría como el tetragonal 4mm, o el transversalmente isotrópico 6mm donde el número de componentes independientes en los tensores es menor.

## Apéndice E

# Modos magneto-electro-elásticos. Ecuación de movimiento

Se considera el sistema de ecuaciones diferenciales acopladas (Eqs. 8-12 de [44]) que describe la propagación de modos magneto-electro-elásticos en un material homogéneo con simetría 6 mm. La magnetización y la polarización del material están dirigidas en la dirección transversal horizontal. Para pasar del sistema de ejes de coordenadas empleado en [44] al establecido por nosotros (figura 2.1) se realizó el cambio:  $x \rightarrow y$ ,  $z \rightarrow x$  y  $y \rightarrow z$ . Como primer paso se llevó el sistema de ecuaciones (Eqs. 8-12 de [44]) a nuestro sistema de ejes de coordenadas. Seguidamente planteamos la solución del nuevo sistema de ecuaciones en la forma  $u_{x,y,z}(\vec{r}) = u_{x,y,z}(z) e^{i(x\kappa_x + y\kappa_y - \omega t)}$ ,  $\varphi(\vec{r}) = \varphi(z) e^{i(x\kappa_x + y\kappa_y - \omega t)}$ ,  $\psi(\vec{r}) = \psi(z) e^{i(x\kappa_x + y\kappa_y - \omega t)}$ . Como resultado se obtuvo el siguiente sistema 2D Fourier transformado:

$$\begin{aligned} & (\rho\omega^2 - c_{11}\kappa_y^2 - c_{44}\kappa_x^2)u_y + c_{66}\frac{d^2u_y}{dz^2} + i(c_{12} + c_{66})\kappa_y\frac{du_z}{dz} \\ & - (c_{13} + c_{44})\kappa_x\kappa_y u_x - (e_{31} + e_{15})\kappa_x\kappa_y\varphi - (f_{31} + f_{15})\kappa_x\kappa_y\psi = 0. \end{aligned} \quad (\text{E.1})$$

$$\begin{aligned} & (\rho\omega^2 - c_{66}\kappa_y^2 - c_{44}\kappa_x^2)u_z + c_{11}\frac{d^2u_z}{dz^2} + i(c_{66} + c_{12})\kappa_y\frac{du_y}{dz} \\ & + i(c_{13} + c_{44})\kappa_x\frac{du_x}{dz} + i(e_{31} + e_{15})\kappa_x\frac{d\varphi}{dz} + i(f_{31} + f_{15})\kappa_x\frac{d\psi}{dz} = 0. \end{aligned} \quad (\text{E.2})$$

$$\begin{aligned} & (\rho\omega^2 - c_{44}\kappa_y^2 - c_{33}\kappa_x^2)u_x + c_{44}\frac{d^2u_x}{dz^2} - (c_{13} + c_{44})\kappa_x\kappa_y u_y + \\ & i(c_{13} + c_{44})\kappa_x\frac{du_z}{dz} - e_{15}\kappa_y^2\varphi + e_{15}\frac{d^2\varphi}{dz^2} - e_{33}\kappa_x^2\varphi - f_{15}\kappa_y^2\psi + f_{15}\frac{d^2\psi}{dz^2} - f_{33}\kappa_x^2\psi = 0. \end{aligned} \quad (\text{E.3})$$

$$\begin{aligned} & -\epsilon_{11}\frac{d^2\varphi}{dz^2} + i(e_{15} + e_{31})\kappa_x\frac{du_z}{dz} + e_{15}\frac{d^2u_x}{dz^2} - g_{11}\frac{d^2\psi}{dz^2} \\ & - (e_{15}\kappa_y^2 + e_{33}\kappa_x^2)u_x - (e_{15} + e_{31})\kappa_y\kappa_x u_y + (\epsilon_{11}\kappa_y^2 + \epsilon_{33}\kappa_x^2)\varphi + (g_{11}\kappa_y^2 + g_{33}\kappa_x^2)\psi = 0. \end{aligned} \quad (\text{E.4})$$

$$\begin{aligned} & -\mu_{11}\frac{d^2\psi}{dz^2} - g_{11}\frac{d^2\varphi}{dz^2} + f_{15}\frac{d^2u_x}{dz^2} + i(f_{15} + f_{31})\kappa_x\frac{du_z}{dz} - (f_{15}\kappa_y^2 + f_{33}\kappa_x^2)u_x \\ & - (f_{15} + f_{31})\kappa_y\kappa_x u_y + (g_{11}\kappa_y^2 + g_{33}\kappa_x^2)\varphi + (\mu_{11}\kappa_y^2 + \mu_{33}\kappa_x^2)\psi = 0. \end{aligned} \quad (\text{E.5})$$

En este sistema de ecuaciones diferenciales acopladas la incógnita  $\mathbf{F}(z) = [u_y, u_z, u_x, \varphi, \psi]^T$ . Los parámetros  $c_{pq}$ ,  $\epsilon_{ij}$ ,  $\mu_{ij}$ ,  $e_{iq}$ ,  $f_{iq}$  y  $g_{ij}$  ( $p, q = 1, \dots, 6; i, j = 1, 2, 3$ ) son los coeficientes elástico, dieléctrico, permeabilidad magnética, piezoeléctrico, piezomagnético y magnetoeléctrico respectivamente.

## Apéndice F

# Propiedades físicas efectivas (Material magneto-electro-elástico)

Propiedades efectivas del compuesto BaTiO<sub>3</sub>/CoFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> cuya fracción molar de BaTiO<sub>3</sub> es 0.3. Los parámetros  $c_{pq}$ ,  $\epsilon_{ij}$ ,  $\mu_{ij}$ ,  $e_{iq}$ ,  $f_{ij}$  y  $g_{ij}$  ( $p, q = 1, \dots, 6; i, j = 1, 2, 3$ ) son los coeficientes elástico, dieléctrico, permeabilidad magnética, piezoeléctrico, piezomagnético y magnetoeléctrico respectivamente,  $\rho$  es la densidad del material. Los valores que aparecen a continuación son aproximados dado que fueron tomados de gráficos de valor efectivo vs fracción molar de BaTiO<sub>3</sub> presentados en las referencias [48] y [49]:

$$\begin{aligned}
 c_{11} &= 250 \text{ (} 10^9 \text{ N/m}^2\text{)} & e_{15} &= 4 \text{ (C/m}^2\text{)} & \mu_{11} &= -410 \text{ (} 10^{-6} \text{ Ns}^2\text{/C}^2\text{)} \\
 c_{12} &= 140 & e_{31} &= 0 & \mu_{33} &= 150 \\
 c_{13} &= 140 & e_{33} &= 0 & & \\
 c_{33} &= 240 & & & & \\
 c_{44} &= 44 & \epsilon_{11} &= 4.06 \text{ (} 10^{-9} \text{ C}^2\text{/Nm}^2\text{)} & \rho &= 5450 \text{ (kg/m}^3\text{)} \\
 c_{66} &= 55 & \epsilon_{33} &= 0 & & \\
 & & & & & \\
 f_{15} &= 378 \text{ (N/Am)} & g_{11} &= -30 \text{ (} 10^{-9} \text{ Ns/VC)} \\
 f_{31} &= 70 & g_{33} &= -40 \\
 f_{33} &= 100 & & & & 
 \end{aligned} \tag{F.1}$$

Inversa de la matriz  $\mathbf{B}$  de la ESLM multiplicada por  $-i$ , considerando los valores anteriores:

$$-i\mathbf{B}^{-1} = i \begin{pmatrix} -1.82 \times 10^{-11} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 - 4.00 \times 10^{-12} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2.10 \times 10^{-11} & -0.021 & 0.000021 \\ 0 & 0 & -0.021 & 2.26 \times 10^8 & 2425.13 \\ 0 & 0 & 0.000021 & 2425.13 & -2458.47 \end{pmatrix}$$

## Apéndice G

# Procedimiento para determinar las matrices de transferencia

El procedimiento que se describe a continuación es esencialmente el desarrollado en el capítulo 2 de [8] para determinar las expresiones de las matrices de transferencia.

Considérese cualquier medio para el cual se asume conocida una base de soluciones Linealmente Independientes  $\mathbf{F}_\ell(z)$  de la Ecuación Sturm-Liouville Matricial compuesta de  $N$  ecuaciones. Se parte de las definiciones de las matrices a tratar, por ejemplo:  $\mathbf{M}$  y  $\mathbf{T}$ :

$$\Phi(z) = \mathbf{M}(z, z_0) \cdot \Phi(z_0) \quad ; \quad \Psi(z) = \mathbf{T}(z, z_0) \cdot \Psi(z_0), \quad (\text{G.1})$$

donde los vectores:

$$\Phi(z) = \begin{vmatrix} \mathbf{F}(z) \\ \mathbf{F}'(z) \end{vmatrix} \quad ; \quad \Psi(z) = \begin{vmatrix} \mathbf{F}(z) \\ \mathbf{A}(z) \end{vmatrix}, \quad (\text{G.2})$$

siendo  $\mathbf{F}'(z)$  la derivada de  $\mathbf{F}(z)$  respecto de  $z$  y  $\mathbf{A}(z)$  la forma diferencial lineal correspondiente a  $\mathbf{F}(z)$ . Se sabe que:

$$\Phi(z) = \sum_{\ell=1}^{2N} a_\ell \Phi_\ell(z) = \sum_{\ell=1}^{2N} a_\ell \begin{vmatrix} \mathbf{F}_\ell(z) \\ \mathbf{F}'_\ell(z) \end{vmatrix}; \quad (\text{G.3})$$

$$\Psi(z) = \sum_{\ell=1}^{2N} a_\ell \Psi_\ell(z) = \sum_{\ell=1}^{2N} a_\ell \begin{vmatrix} \mathbf{F}_\ell(z) \\ \mathbf{A}_\ell(z) \end{vmatrix}. \quad (\text{G.4})$$

Estas expresiones se simplifican definiendo las matrices:

$$\mathbf{N}(z) = \begin{vmatrix} \Phi_1(z) & \Phi_2(z) & \dots & \Phi_{2N}(z) \end{vmatrix}; \quad (\text{G.5})$$

$$\mathbf{Q}(z) = \begin{vmatrix} \Psi_1(z) & \Psi_2(z) & \dots & \Psi_{2N}(z) \end{vmatrix}, \quad (\text{G.6})$$

y el vector  $\mathbf{a} = [a_1, a_2, \dots, a_{2N}]^T$  que contiene los coeficientes de expansión, por ejemplo:

$$\Phi(z) = \mathbf{N}(z) \cdot \mathbf{a}, \quad (\text{G.7})$$

$$\Phi(z_0) = \mathbf{N}(z_0) \cdot \mathbf{a}, \quad (\text{G.8})$$

$$\mathbf{a} = \mathbf{N}(z_0)^{-1} \cdot \Phi(z_0). \quad (\text{G.9})$$

Finalmente considerando las definiciones (G.1) se tiene que:

$$\mathbf{M}(z, z_0) = \mathbf{N}(z) \cdot \mathbf{N}(z_0)^{-1} \quad \mathbf{T}(z, z_0) = \mathbf{Q}(z) \cdot \mathbf{Q}(z_0)^{-1} \quad (\text{G.10})$$

## Apéndice H

# Matriz de transferencia asociada en términos del espesor de una capa de material homogéneo

Siguiendo el procedimiento algebraico y analítico desarrollado en [8] la matriz  $\mathbf{T}(\alpha : z, z_0)$  podrá expresarse en la forma:

$$\mathbf{T}(z, z_0) = \mathbf{Q}(z) \cdot \mathbf{Q}(z_0)^{-1}, \quad (\text{H.1})$$

donde la matriz auxiliar  $\mathbf{Q}(z)$  se compone de una base de soluciones LI del sistema diferencial (2.5) y de las formas diferenciales lineales correspondientes:

$$\mathbf{Q}(z) = \begin{vmatrix} \mathbf{F}_1(z) & \mathbf{F}_2(z) & \dots & \mathbf{F}_{2N}(z) \\ \mathbf{A}_1(z) & \mathbf{A}_2(z) & \dots & \mathbf{A}_{2N}(z) \end{vmatrix}. \quad (\text{H.2})$$

Recordemos que  $N$  es el número de ecuaciones diferenciales de segundo orden involucradas en el sistema (2.5). Si el medio es homogéneo la base de soluciones LI suele componerse de las eigenfunciones  $\mathbf{F}_\ell(z)$  del QEP (sección 2.2). Asumamos un dominio homogéneo de espesor  $d = z - z_0$ . Considerando la expresión  $\mathbf{F}_\ell(z) = \mathbf{F}_{0\ell} \exp[ik_\ell z]$ ;  $\ell = 1, 2, \dots, 2N$  para las eigenfunciones, tendremos que  $\mathbf{A}_\ell(z) = \mathbf{A}_{0\ell} \exp[ik_\ell z]$ . Definamos las particiones  $N \times N$ :

$$\mathbf{A}_{0(N)} = [\mathbf{A}_{01} \dots \mathbf{A}_{0N}]; \quad (\text{H.3})$$

$$\mathbf{A}_{0(2N)} = [\mathbf{A}_{0N+1} \dots \mathbf{A}_{2N}]; \quad (\text{H.4})$$

$$\mathbf{F}_{0(N)} = [\mathbf{F}_{01} \dots \mathbf{F}_{0N}]; \quad (\text{H.5})$$

$$\mathbf{F}_{0(2N)} = [\mathbf{F}_{0N+1} \dots \mathbf{F}_{2N}]. \quad (\text{H.6})$$

Entonces la expresión (H.2) puede reescribirse en la forma:

$$\mathbf{Q}(z) = \begin{vmatrix} \mathbf{F}_{0(N)} & \mathbf{F}_{0(2N)} \\ \mathbf{A}_{0(N)} & \mathbf{A}_{0(2N)} \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} \mathbf{\Pi}_{k_N}(d) & \mathbf{0}_N \\ \mathbf{0}_N & \mathbf{\Pi}_{k_{2N}}(d) \end{vmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{\Pi}_{k_N}(z_0) & \mathbf{0}_N \\ \mathbf{0}_N & \mathbf{\Pi}_{k_{2N}}(z_0) \end{bmatrix}. \quad (\text{H.7})$$

Las matrices  $\mathbf{\Pi}_{k_N}(X)$  y  $\mathbf{\Pi}_{k_{2N}}(X)$ ; donde  $X$  puede ser  $z$ ,  $d$  o  $z_0$ , vienen dadas por las expresiones:

$$\mathbf{\Pi}_{k_N}(X) = \begin{vmatrix} e^{ik_1 X} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & e^{ik_2 X} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & e^{ik_N X} \end{vmatrix}; \quad (\text{H.8})$$

$$\mathbf{\Pi}_{k_{2N}}(X) = \begin{vmatrix} e^{ik_{N+1}X} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & e^{ik_{N+2}X} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & e^{ik_{2N}X} \end{vmatrix}. \quad (\text{H.9})$$

Entonces se tiene que:

$$\mathbf{Q}(z_0) = \begin{vmatrix} \mathbf{F}_{0(N)} & \mathbf{F}_{0(2N)} \\ \mathbf{A}_{0(N)} & \mathbf{A}_{0(2N)} \end{vmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{\Pi}_{k_N}(z_0) & \mathbf{0}_N \\ \mathbf{0}_N & \mathbf{\Pi}_{k_{2N}}(z_0) \end{bmatrix}. \quad (\text{H.10})$$

Luego la expresión (H.1) resulta:

$$\mathbf{T}(z, z_0) = \mathbf{T}(d) = \begin{vmatrix} \mathbf{F}_{0(N)} & \mathbf{F}_{0(2N)} \\ \mathbf{A}_{0(N)} & \mathbf{A}_{0(2N)} \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} \mathbf{\Pi}_{k_N}(d) & \mathbf{0}_N \\ \mathbf{0}_N & \mathbf{\Pi}_{k_{2N}}(d) \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} \mathbf{F}_{0(N)} & \mathbf{F}_{0(2N)} \\ \mathbf{A}_{0(N)} & \mathbf{A}_{0(2N)} \end{vmatrix}^{-1}. \quad (\text{H.11})$$

De aquí que sus particiones  $N \times N$  queden expresadas:

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_{11} &= \mathbf{F}_{0(N)} \cdot \mathbf{\Pi}_{k_N}(d) \cdot \gamma_{11}^{-1} + \mathbf{F}_{0(2N)} \cdot \mathbf{\Pi}_{k_{2N}}(d) \gamma_{12}^{-1} \cdot \\ \mathbf{T}_{12} &= \mathbf{F}_{0(N)} \cdot \mathbf{\Pi}_{k_N}(d) \cdot \gamma_{21}^{-1} + \mathbf{F}_{0(2N)} \cdot \mathbf{\Pi}_{k_{2N}}(d) \gamma_{22}^{-1} \cdot \\ \mathbf{T}_{21} &= \mathbf{A}_{0(N)} \cdot \mathbf{\Pi}_{k_N}(d) \cdot \gamma_{11}^{-1} + \mathbf{A}_{0(2N)} \cdot \mathbf{\Pi}_{k_{2N}}(d) \gamma_{12}^{-1} \cdot \\ \mathbf{T}_{22} &= \mathbf{A}_{0(N)} \cdot \mathbf{\Pi}_{k_N}(d) \cdot \gamma_{21}^{-1} + \mathbf{A}_{0(2N)} \cdot \mathbf{\Pi}_{k_{2N}}(d) \gamma_{22}^{-1} \cdot \end{aligned} \quad (\text{H.12})$$

$$\begin{aligned} \gamma_{11} &= [\mathbf{F}_{0(N)} - \mathbf{F}_{0(2N)} \cdot \mathbf{A}_{0(2N)}^{-1} \cdot \mathbf{A}_{0(N)}] \cdot \\ \gamma_{12} &= [\mathbf{F}_{0(2N)} - \mathbf{F}_{0(N)} \cdot \mathbf{A}_{0(N)}^{-1} \cdot \mathbf{A}_{0(2N)}] \cdot \\ \gamma_{21} &= [\mathbf{A}_{0(N)} - \mathbf{A}_{0(2N)} \cdot \mathbf{F}_{0(2N)}^{-1} \cdot \mathbf{F}_{0(N)}] \cdot \\ \gamma_{22} &= [\mathbf{A}_{0(2N)} - \mathbf{A}_{0(N)} \cdot \mathbf{F}_{0(N)}^{-1} \cdot \mathbf{F}_{0(2N)}] \cdot \end{aligned} \quad (\text{H.13})$$

## Apéndice I

# Matriz de rigidez en términos del espesor de una capa de material homogéneo

Aplicando para  $\mathbf{E}(z, z_0)$  el procedimiento desarrollado en el capítulo 2 de [8] y que condujo a la expresión (3.7) tendremos que:

$$\mathbf{E}(z, z_0) = \left| \begin{array}{cccc} \mathbf{A}_1(z_0) & \mathbf{A}_2(z_0) & \dots & \mathbf{A}_{2N}(z_0) \\ \mathbf{A}_1(z) & \mathbf{A}_2(z) & \dots & \mathbf{A}_{2N}(z) \end{array} \right| \cdot \left| \begin{array}{cccc} \mathbf{F}_1(z_0) & \mathbf{F}_2(z_0) & \dots & \mathbf{F}_{2N}(z_0) \\ \mathbf{F}_1(z) & \mathbf{F}_2(z) & \dots & \mathbf{F}_{2N}(z) \end{array} \right|^{-1}. \quad (\text{I.1})$$

Considerando la expresión  $\mathbf{F}_\ell(z) = \mathbf{F}_{0\ell} \exp[ik_\ell z]$ ;  $\ell = 1, 2, \dots, 2N$  para las eigenfunciones, tendremos que  $\mathbf{A}_\ell(z) = \mathbf{A}_{0\ell} \exp[ik_\ell z]$ . Definamos las particiones  $N \times N$ :

$$\mathbf{A}_{0(N)} = [\mathbf{A}_{01} \dots \mathbf{A}_{0N}]; \quad (\text{I.2})$$

$$\mathbf{A}_{0(2N)} = [\mathbf{A}_{0N+1} \dots \mathbf{A}_{2N}]; \quad (\text{I.3})$$

$$\mathbf{F}_{0(N)} = [\mathbf{F}_{01} \dots \mathbf{F}_{0N}]; \quad (\text{I.4})$$

$$\mathbf{F}_{0(2N)} = [\mathbf{F}_{0N+1} \dots \mathbf{F}_{2N}]. \quad (\text{I.5})$$

Asumamos un dominio homogéneo de espesor  $d = z - z_0$ . La primera matriz de (I.1) puede expresarse en la forma:

$$\left| \begin{array}{cccc} \mathbf{A}_1(z_0) & \mathbf{A}_2(z_0) & \dots & \mathbf{A}_{2N}(z_0) \\ \mathbf{A}_1(z) & \mathbf{A}_2(z) & \dots & \mathbf{A}_{2N}(z) \end{array} \right| = \left| \begin{array}{cc} \mathbf{A}_{0(N)} & \mathbf{A}_{0(2N)} \cdot \mathbf{\Pi}_{k_{2N}}(-d) \\ \mathbf{A}_{0(N)} \cdot \mathbf{\Pi}_{k_N}(d) & \mathbf{A}_{0(2N)} \end{array} \right| \cdot \left[ \begin{array}{cc} \mathbf{\Pi}_{k_N}(z_0) & \mathbf{0}_N \\ \mathbf{0}_N & \mathbf{\Pi}_{k_{2N}}(z) \end{array} \right]. \quad (\text{I.6})$$

Las matrices  $\mathbf{\Pi}_{k_N}(X)$  y  $\mathbf{\Pi}_{k_{2N}}(X)$  donde  $X$  puede ser  $z$ ,  $d$  o  $z_0$ , vienen expresadas en el apéndice H.

De forma análoga:

$$\left| \begin{array}{cccc} \mathbf{F}_1(z_0) & \mathbf{F}_2(z_0) & \dots & \mathbf{F}_{2N}(z_0) \\ \mathbf{F}_1(z) & \mathbf{F}_2(z) & \dots & \mathbf{F}_{2N}(z) \end{array} \right| = \left| \begin{array}{cc} \mathbf{F}_{0(N)} & \mathbf{F}_{0(2N)} \cdot \mathbf{\Pi}_{k_{2N}}(-d) \\ \mathbf{F}_{0(N)} \cdot \mathbf{\Pi}_{k_N}(d) & \mathbf{F}_{0(2N)} \end{array} \right| \cdot \left[ \begin{array}{cc} \mathbf{\Pi}_{k_N}(z_0) & \mathbf{0}_N \\ \mathbf{0}_N & \mathbf{\Pi}_{k_{2N}}(z) \end{array} \right]. \quad (\text{I.7})$$

Sustituyendo ambas expresiones en (I.1) se obtiene que:

$$\mathbf{E}(d) = \left| \begin{array}{cc} \mathbf{A}_{0(N)} & \mathbf{A}_{0(2N)} \cdot \mathbf{\Pi}_{k_{2N}}(-d) \\ \mathbf{A}_{0(N)} \cdot \mathbf{\Pi}_{k_N}(d) & \mathbf{A}_{0(2N)} \end{array} \right| \cdot \left| \begin{array}{cc} \mathbf{F}_{0(N)} & \mathbf{F}_{0(2N)} \cdot \mathbf{\Pi}_{k_{2N}}(-d) \\ \mathbf{F}_{0(N)} \cdot \mathbf{\Pi}_{k_N}(d) & \mathbf{F}_{0(2N)} \end{array} \right|^{-1}. \quad (\text{I.8})$$



## Apéndice J

# Relación entre las matrices S y H

Consideremos la representación de un sistema a capas mostrada en la figura 1.2. El dominio intermedio M puede consistir en una simple capa o puede ser un compuesto. Supongamos conocida la matriz híbrida  $\mathbf{H}(z_R, z_L)$  para M tal que:

$$\begin{vmatrix} \mathbf{F}(\mathbf{L} : z_L) \\ \mathbf{A}(\mathbf{R} : z_R) \end{vmatrix} = \mathbf{H}(z_R; z_L) \cdot \begin{vmatrix} \mathbf{A}(\mathbf{L} : z_L) \\ \mathbf{F}(\mathbf{R} : z_R) \end{vmatrix}. \quad (\text{J.1})$$

Asumamos homogéneos los dominios externos L y R y que para cada uno de ellos es conocida una base de soluciones LI:  $\mathbf{F}_\ell(\mathbf{L} : z)$  y  $\mathbf{F}_\ell(\mathbf{R} : z)$ ;  $\ell = 1, 2, \dots, 2N$ .

Considérese la matriz auxiliar:

$$\mathbf{Q}(\alpha : z) = \begin{vmatrix} \mathbf{F}_1(\alpha : z) & \dots & \mathbf{F}_N(\alpha : z) & \mathbf{F}_{N+1}(\alpha : z) & \dots & \mathbf{F}_{2N}(\alpha : z) \\ \mathbf{A}_1(\alpha : z) & \dots & \mathbf{A}_N(\alpha : z) & \mathbf{A}_{N+1}(\alpha : z) & \dots & \mathbf{A}_{2N}(\alpha : z) \end{vmatrix}, \quad (\text{J.2})$$

donde  $\alpha$  representa uno de los dominios L, R. Supongamos que seleccionamos las eigenfunciones de manera tal que:

$$\mathbf{F}(\alpha : z) = \mathbf{Q}_{11}(\alpha : z) \cdot \mathbf{a}(\alpha)^+ + \mathbf{Q}_{12}(\alpha : z) \cdot \mathbf{a}(\alpha)^-; \quad (\text{J.3})$$

$$\mathbf{A}(\alpha : z) = \mathbf{Q}_{21}(\alpha : z) \cdot \mathbf{a}(\alpha)^+ + \mathbf{Q}_{22}(\alpha : z) \cdot \mathbf{a}(\alpha)^-, \quad (\text{J.4})$$

donde  $\mathbf{a}(\alpha)^+/\mathbf{a}(\alpha)^-$  es el vector formado por los coeficientes de expansión  $a_\ell(\alpha)$  correspondientes a las eigenfunciones  $\mathbf{F}_\ell(\alpha : z)$  que viajan a la derecha/izquierda.  $\mathbf{Q}_{ij}(\alpha : z)$ ;  $i, j = 1, 2$  son las particiones de orden  $N \times N$  de  $\mathbf{Q}(\alpha : z)$ .

Expresemos el miembro izquierdo de (J.1) en la forma:

$$\begin{vmatrix} \mathbf{F}(\mathbf{L} : z_L) \\ \mathbf{A}(\mathbf{R} : z_R) \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \mathbf{Q}_{12}(\mathbf{L} : z_L) & \mathbf{0}_N \\ \mathbf{0}_N & \mathbf{Q}_{21}(\mathbf{R} : z_R) \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} \mathbf{a}(\mathbf{L})^- \\ \mathbf{a}(\mathbf{R})^+ \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} \mathbf{Q}_{11}(\mathbf{L} : z_L) & \mathbf{0}_N \\ \mathbf{0}_N & \mathbf{Q}_{22}(\mathbf{R} : z_R) \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} \mathbf{a}(\mathbf{L})^+ \\ \mathbf{a}(\mathbf{R})^- \end{vmatrix}. \quad (\text{J.5})$$

Para el segundo factor del miembro derecho de (J.1) tendremos que:

$$\begin{vmatrix} \mathbf{A}(\mathbf{L} : z_L) \\ \mathbf{F}(\mathbf{R} : z_R) \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \mathbf{Q}_{22}(\mathbf{L} : z_L) & \mathbf{0}_N \\ \mathbf{0}_N & \mathbf{Q}_{11}(\mathbf{R} : z_R) \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} \mathbf{a}(\mathbf{L})^- \\ \mathbf{a}(\mathbf{R})^+ \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} \mathbf{Q}_{21}(\mathbf{L} : z_L) & \mathbf{0}_N \\ \mathbf{0}_N & \mathbf{Q}_{12}(\mathbf{R} : z_R) \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} \mathbf{a}(\mathbf{L})^+ \\ \mathbf{a}(\mathbf{R})^- \end{vmatrix}. \quad (\text{J.6})$$

El paso siguiente es sustituir (J.5) y (J.6) en (J.1). Entonces teniendo en cuenta la definición de la matriz de dispersión  $\mathbf{S}(\mathbf{R}; \mathbf{L})$  dada en (3.26):

$$\begin{vmatrix} \mathbf{a}^-(\mathbf{L}) \\ \mathbf{a}^+(\mathbf{R}) \end{vmatrix} = \mathbf{S}(\mathbf{R}; \mathbf{L}) \cdot \begin{vmatrix} \mathbf{a}^+(\mathbf{L}) \\ \mathbf{a}^-(\mathbf{R}) \end{vmatrix}, \quad (\text{J.7})$$

después de acomodar términos se tiene que:

$$\mathbf{S}(\mathbf{R}; \mathbf{L}) = \left[ \begin{pmatrix} \mathbf{Q}_{12}(\mathbf{L} : z_L) & \mathbf{0}_N \\ \mathbf{0}_N & \mathbf{Q}_{21}(\mathbf{R} : z_R) \end{pmatrix} - \mathbf{H}(z_R, z_L) \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{Q}_{22}(\mathbf{L} : z_L) & \mathbf{0}_N \\ \mathbf{0}_N & \mathbf{Q}_{11}(\mathbf{R} : z_R) \end{pmatrix} \right]^{-1} \cdot \left[ \mathbf{H}(z_R, z_L) \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{Q}_{21}(\mathbf{L} : z_L) & \mathbf{0}_N \\ \mathbf{0}_N & \mathbf{Q}_{12}(\mathbf{R} : z_R) \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \mathbf{Q}_{11}(\mathbf{L} : z_L) & \mathbf{0}_N \\ \mathbf{0}_N & \mathbf{Q}_{22}(\mathbf{R} : z_R) \end{pmatrix} \right]. \quad (\text{J.8})$$

## Apéndice K

# Transformación de la ecuación de movimiento de la onda TH piezoeléctrica a la forma Sturm-Liouville Matricial

El sistema inicial de dos ecuaciones diferenciales acopladas es el siguiente:

$$\begin{aligned} c\nabla^2 u + e\nabla^2 \phi &= \rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}; \\ e\nabla^2 u - \epsilon \nabla^2 \phi &= 0, \end{aligned} \quad (\text{K.1})$$

donde  $u \equiv u_x(y, z)$  es el desplazamiento transversal en la dirección  $x$  y  $\phi \equiv \phi(y, z)$  el potencial eléctrico.

Escribamos este sistema en la forma siguiente:

$$\begin{aligned} c \left( \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + e \left( \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \right) &= \rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}; \\ e \left( \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) - \epsilon \left( \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \right) &= 0. \end{aligned} \quad (\text{K.2})$$

Considerando la simetría planar del sistema a capas, busquemos soluciones en la forma:

$$u = u(z) e^{i(\kappa_y y - \omega t)}; \quad (\text{K.3})$$

$$\phi = \phi(z) e^{i(\kappa_y y - \omega t)}. \quad (\text{K.4})$$

Entonces el sistema (K.2) se transforma en el sistema:

$$\begin{aligned} c \frac{d^2 u(z)}{dz^2} - c \kappa_y^2 u(z) + e \frac{d^2 \phi(z)}{dz^2} - e \kappa_y^2 \phi(z) &= -\rho \omega^2 u(z); \\ e \frac{d^2 u(z)}{dz^2} - e \kappa_y^2 u(z) - \epsilon \frac{d^2 \phi(z)}{dz^2} + \epsilon \kappa_y^2 \phi(z) &= 0. \end{aligned} \quad (\text{K.5})$$

Luego de acomodar convenientemente los términos tendremos:

$$c \frac{d^2 u(z)}{dz^2} + e \frac{d^2 \phi(z)}{dz^2} + (\rho\omega^2 - c \kappa_y^2) u(z) - e \kappa_y^2 \phi(z) = 0; \quad (\text{K.6})$$

$$e \frac{d^2 u(z)}{dz^2} - \epsilon \frac{d^2 \phi(z)}{dz^2} - e \kappa_y^2 u(z) + \epsilon \kappa_y^2 \phi(z) = 0. \quad (\text{K.7})$$

Por otra parte, en el sistema que tratamos, los parámetros  $c$ ,  $e$  y  $\epsilon$  son constantes en cada capa. Luego la ESLM (1.1) tendrá coeficientes constantes y puede escribirse así:

$$B_{i1} \frac{d^2 u(z)}{dz^2} + B_{i2} \frac{d^2 \phi(z)}{dz^2} + (P + Y)_{i1} \frac{du(z)}{dz} + (P + Y)_{i2} \frac{d\phi(z)}{dz} + W_{i1} u(z) + W_{i2} \phi(z) = 0, \quad i = 1, 2, \quad (\text{K.8})$$

de manera que con  $i = 1$  tenemos la ecuación (K.6) y con  $i = 2$  tenemos la ecuación (K.7).

Entonces:

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} c & e \\ e & -\epsilon \end{pmatrix}, \quad (\text{K.9})$$

$$\mathbf{P} = \mathbf{Y} = \mathbf{0}, \quad (\text{K.10})$$

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} \rho\omega^2 - c \kappa_y^2 & -e \kappa_y^2 \\ -e \kappa_y^2 & \epsilon \kappa_y^2 \end{pmatrix}. \quad (\text{K.11})$$

# Apéndice L

## Tensor de rigidez

Denotemos con  $c_{ijkl}$  las componentes del tensor de rigidez. Este es un tensor de cuarto rango ( $3^4 = 81$  componentes) que expresa la relación lineal más general posible entre el tensor de tensiones  $T_{ij}$  y el tensor de deformaciones  $S_{kl}$ :

$$T_{ij} = c_{ijkl} S_{kl} . \quad (\text{L.1})$$

Debido a que los tensores  $T_{ij}$  y  $S_{kl}$  son simétricos, las constantes elásticas definidas por (L.1) no se afectan ya sea porque los primeros dos subíndices o los dos últimos sean intercambiados, esto es:

$$c_{ijkl} = c_{jikl} \text{ y } c_{ijkl} = c_{ijlk} . \quad (\text{L.2})$$

Estas relaciones de simetría reducen el número de constantes elásticas independientes de 81 a 36. En efecto, con el par de índices  $(i, j)$  solo pueden representarse 6 valores independientes. Estos pueden numerarse del 1 al 6 como sigue [41]:

$$\begin{aligned} (11) &\leftrightarrow 1 & (22) &\leftrightarrow 2 & (33) &\leftrightarrow 3 \\ (23) = (32) &\leftrightarrow 4 & (31) = (13) &\leftrightarrow 5 & (12) = (21) &\leftrightarrow 6. \end{aligned} \quad (\text{L.3})$$

Lo mismo ocurre con el par de índices  $(k, l)$ . Por tanto las constantes elásticas  $c_{ijkl}$  pueden ser representadas en términos de solo dos índices  $\alpha$  y  $\beta$  que toman valores de 1 a 6 en correspondencia con una matriz cuadrada de orden  $6 \times 6$  de 36 elementos. Esto es:

$$c_{\alpha\beta} = c_{ijkl} , \quad (\text{L.4})$$

donde  $\alpha$  está vinculado con  $(ij)$  y  $\beta$  con  $(kl)$  de acuerdo con (L.3). Por ejemplo:

$$\begin{aligned} c_{14} &= c_{1123} = c_{1132} \\ c_{56} &= c_{1312} = c_{1321} = c_{3121} = c_{3112} . \end{aligned} \quad (\text{L.5})$$

La matriz  $6 \times 6$  de los coeficientes  $c_{\alpha\beta}$  también es simétrica respecto a su diagonal principal en virtud relación de Maxwell [41], es decir:

$$c_{\alpha\beta} = c_{\beta\alpha} . \quad (\text{L.6})$$

Por tanto el número de constantes elásticas independientes del tensor de rigidez se reduce a 21.

## Apéndice M

# Ecuación de la onda elástica en un cristal isotrópico

La ecuación de la onda elástica en un sólido homogéneo es el resultado de la segunda ley de Newton y de la ley de Hooke [41]:

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = c_{ijkl} \frac{\partial^2 u_l}{\partial x_j \partial x_k}; \quad (i, j, k, l) = 1, 2, 3. \quad (\text{M.1})$$

Aquí  $u_1$ ,  $u_2$  y  $u_3$  son las componentes del desplazamiento de un punto arbitrario en el sólido;  $c_{ijkl}$  son las componentes del tensor de rigidez (tensor elástico) y  $\rho$  la densidad de masa del material. Se trata de un sistema de tres ecuaciones diferenciales de segundo orden acopladas.

Para un cristal isotrópico la representación  $c_{\alpha\beta}$  de los elementos  $c_{ijkl}$  toma los valores:

$$c_{\alpha\beta} = \begin{vmatrix} \Gamma & \lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \Gamma & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda & \Gamma & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mu \end{vmatrix}, \quad (\text{M.2})$$

Teniendo en cuenta las componentes del tensor  $c_{ijkl}$  que no se anulan, la expansión del sistema de ecuaciones (M.1) resulta:

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial^2 u_1}{\partial t^2} &= \Gamma \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1^2} + \lambda \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_1 \partial x_2} + \lambda \frac{\partial^2 u_3}{\partial x_1 \partial x_3} + \mu \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_2 \partial x_1} \\ &+ \mu \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_2^2} + \mu \frac{\partial^2 u_3}{\partial x_3 \partial x_1} + \mu \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_3^2}; \end{aligned} \quad (\text{M.3})$$

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial^2 u_2}{\partial t^2} &= \mu \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_1^2} + \mu \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1 \partial x_2} + \lambda \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_2 \partial x_1} + \Gamma \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_2^2} \\ &+ \lambda \frac{\partial^2 u_3}{\partial x_2 \partial x_3} + \mu \frac{\partial^2 u_3}{\partial x_3 \partial x_2} + \mu \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_3^2}; \end{aligned} \quad (\text{M.4})$$

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial^2 u_3}{\partial t^2} = & \mu \frac{\partial^2 u_3}{\partial x_1^2} + \mu \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1 \partial x_3} + \mu \frac{\partial^2 u_3}{\partial x_2^2} + \mu \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_2 \partial x_3} \\ & + \lambda \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_3 \partial x_1} + \lambda \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_3 \partial x_2} + \Gamma \frac{\partial^2 u_3}{\partial x_3^2}. \end{aligned} \quad (\text{M.5})$$

Utilicemos la notación  $u_x, u_y, u_z$  en lugar de  $u_1, u_2, u_3$  respectivamente y  $x, y, z$  en lugar de  $x_1, x_2, x_3$ . Consideremos un sistema a capas con simetría planar en el que hemos dirigido el eje  $z$  en la dirección perpendicular a las intercaras de dicha heteroestructura. Entonces planteemos las soluciones del sistema (M.3-M.5) en la forma:  $\vec{u}(x, y, z) = \vec{u}(z) e^{i(\kappa_x x + \kappa_y y - \omega t)}$  donde  $\vec{u} = [u_x, u_y, u_z]^T$ . Como resultado se obtiene el siguiente sistema para  $\vec{u}(z)$ :

$$\begin{aligned} \mu \frac{d^2 u_x}{dz^2} + i\kappa_x(\lambda + \mu) \frac{du_z}{dz} + (\rho\omega^2 - \Gamma\kappa_x^2 - \mu\kappa_y^2) u_x \\ - (\lambda + \mu)\kappa_x\kappa_y u_y = 0; \end{aligned} \quad (\text{M.6})$$

$$\begin{aligned} \mu \frac{d^2 u_y}{dz^2} + i\kappa_y(\lambda + \mu) \frac{du_z}{dz} + (\rho\omega^2 - \mu\kappa_x^2 - \Gamma\kappa_y^2) u_y \\ - (\mu + \lambda)\kappa_x\kappa_y u_x = 0; \end{aligned} \quad (\text{M.7})$$

$$\begin{aligned} \Gamma \frac{d^2 u_z}{dz^2} + i\kappa_x(\mu + \lambda) \frac{du_x}{dz} + i\kappa_y(\mu + \lambda) \frac{du_y}{dz} \\ + (\rho\omega^2 - \mu\kappa_x^2 - \mu\kappa_y^2) u_z = 0. \end{aligned} \quad (\text{M.8})$$

## Apéndice N

# Cálculo del factor de Localización (FL)

### Cálculo del FL en términos de la matriz de dispersión $\mathbf{S}(\mathbf{R}; \mathbf{L})$

Consideremos el problema de contorno planteado en el capítulo 4 para un sistema de barreras finitas. Para un experimento en el cual la onda incidente por la izquierda  $\mathbf{L}$  se refleja y se transmite parcialmente, tenemos que la matriz de reflexión/transmisión de amplitudes  $-\mathbf{r} / \mathbf{t}-$  viene dada por:

$$\mathbf{r} = \mathbf{S}_{11}(\mathbf{R}; \mathbf{L}) \quad (\text{N.1})$$

$$\mathbf{t} = \mathbf{S}_{21}(\mathbf{R}; \mathbf{L}). \quad (\text{N.2})$$

Para incidencia por la derecha  $\mathbf{R}$ , la matriz de reflexión/transmisión de amplitudes  $-\mathbf{r}' / \mathbf{t}'-$  resulta:

$$\mathbf{r}' = \mathbf{S}_{22}(\mathbf{R}; \mathbf{L}) \quad (\text{N.3})$$

$$\mathbf{t}' = \mathbf{S}_{12}(\mathbf{R}; \mathbf{L}). \quad (\text{N.4})$$

El factor de Localización (o el  $N$ -ésimo exponente de Lyapunov:  $\gamma_N$ ) puede calcularse a partir de los elementos  $\mathbf{t}'_{ij}$  de la matriz de transmisión  $\mathbf{t}'$  de orden  $(N \times N)$ . Para ello puede utilizarse la ecuación (7) de [71]. Utilizando nuestra notación tenemos que:

$$\gamma_N = - \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{1}{m} \ln |\mathbf{t}'_{ij}|_{\max}, \quad (\text{N.5})$$

donde  $m$  es el número de celdas unitarias en el cristal fonónico. Este resultado convergerá al valor exacto del exponente de Lyapunov para  $m$  suficientemente grande.

### Cálculo del FL en términos de la matriz de transferencia asociada $\mathbf{T}$

Para calcular este parámetro en términos de  $\mathbf{T}$  utilizaremos el algoritmo de Wolf (para hallar múltiples exponentes de Lyapunov) expuesto en [70]. Debido a que las dimensiones de las matrices de transferencia que trabajamos son  $2N \times 2N$ , entonces habrán  $N$  pares de exponentes de Lyapunov. Para sistemas periódicos o cercanamente periódicos, los exponentes de Lyapunov presentan las siguientes propiedades [70]:

$$\gamma_1 \geq \gamma_2 \geq \dots \geq \gamma_N \geq 0, \quad \gamma_{N+i} = -\gamma_i, \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (\text{N.6})$$

Para  $N = 2$  el factor de localización corresponde con  $\gamma_2$ , el exponente de Lyapunov positivo más pequeño. Siguiendo el mencionado algoritmo, se parte de un conjunto arbitrario compuesto de dos vectores de estado



independientes de dimensión  $2N$ :  $\mathbf{v}_{01}$ ,  $\mathbf{v}_{02}$ . El primer subíndice se referirá a la celda unitaria (o número de iteración), mientras que el segundo subíndice se utiliza para distinguir entre los dos vectores. A partir de las expresiones (5.72)-(5.75) de las eigenfunciones y sus correspondientes formas diferenciales lineales, seleccionamos los vectores de estado  $\mathbf{v}_{01} = [\mathbf{F}_{01}, \mathbf{A}_{01}]^T$  y  $\mathbf{v}_{02} = [\mathbf{F}_{02}, \mathbf{A}_{02}]^T$ :

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{01} &= \begin{vmatrix} \kappa'_y \\ q'_L \end{vmatrix} & \mathbf{F}_{02} &= \begin{vmatrix} \kappa'_y \\ -q'_L \end{vmatrix}; \\ \mathbf{A}_{01} &= i \begin{vmatrix} 2q'_L \kappa'_y \mu' \\ q'^2_L \Gamma' + \kappa'^2_y \lambda' \end{vmatrix} & \mathbf{A}_{02} &= i \begin{vmatrix} -2q'_L \kappa'_y \mu' \\ q'^2_L \Gamma' + \kappa'^2_y \lambda' \end{vmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{N.7})$$

Como siguiente paso se utiliza la re-ortonormalización de Gram-Schmidt para construir un conjunto de vectores ortonormales que denotamos:  $\mathbf{v}'_{01}$  y  $\mathbf{v}'_{02}$ . Después se multiplica cada uno de estos vectores por la misma matriz de transferencia, lo que equivale a transferir cada vector de estado a través de una celda unitaria del sistema desordenado. Entonces se utiliza el mismo procedimiento de re-ortonormalización para construir el nuevo conjunto ortonormal. Este proceso se repite para las  $m$  celdas unitarias (número de iteraciones) del sistema. En la  $j$ -ésima iteración se utiliza la matriz  $\mathbf{T}_j$  correspondiente a la  $j$ -ésima celda unitaria. Finalmente se calcula el segundo exponente de Lyapunov positivo, utilizando la ecuación (23) de la referencia [70], expresada con nuestra notación:

$$\gamma_2 \approx \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m \ln \langle \mathbf{v}_{j2}, \mathbf{v}'_{j2} \rangle. \quad (\text{N.8})$$

Este resultado converge al valor exacto del segundo exponente de Lyapunov para  $m$  suficientemente grande. Aquí  $\langle \mathbf{v}_{j2}, \mathbf{v}'_{j2} \rangle = \mathbf{v}_{j2}^* \mathbf{v}'_{j2}$  es el producto interno de dos vectores. El asterisco (\*) denota el complejo conjugado del vector. Para  $N = 1$  el mencionado algoritmo conduce a [70]:

$$\gamma_1 \approx \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m \ln \left\| \mathbf{T}_j \cdot \frac{\mathbf{v}_{(j-1)1}}{\|\mathbf{v}_{(j-1)1}\|} \right\|, \quad (\text{N.9})$$

donde  $\|\cdot\|$  indica la norma del argumento.

Para incidencia normal ( $\kappa_y = 0$ ) nótese que las ecuaciones (5.55)-(5.56) se desacoplan en una ecuación para la componente  $u_y$  (onda S) y en una ecuación para la componente  $u_z$  (onda P), ambas en el plano  $yz$  de la figura 5.8. Tenemos dos casos  $N = 1$ . Para analizar la propagación de la onda P por medio de (N.9) se partió del vector  $\mathbf{v}_{01} = [1, iq_L]^T$ , definido a partir de una de las soluciones LI de la ecuación que resulta para  $u_z$  y de la forma diferencial lineal correspondiente. De forma análoga, para el análisis de la propagación de la onda S se partió del vector  $\mathbf{v}_{01} = [1, iq_T]^T$ . En nuestros cálculos los parámetros incluidos en los vectores  $\mathbf{v}_{01}$  y  $\mathbf{v}_{02}$  tomaron los valores correspondientes al material A.

Para la propagación de las ondas P en la dirección normal, la matriz  $\mathbf{T}_\alpha$  de una subcelda, ( $\alpha = A, B$  según el material de la subcelda) viene dada por:

$$\mathbf{T}_\alpha = \begin{pmatrix} \cos(q'_{L\alpha} \zeta_\alpha) & \sin(q'_{L\alpha} \zeta_\alpha) / q'_{L\alpha} \Gamma'_\alpha \\ -\sin(q'_{L\alpha} \zeta_\alpha) q'_{L\alpha} \Gamma'_\alpha & \cos(q'_{L\alpha} \zeta_\alpha) \end{pmatrix}, \quad (\text{N.10})$$

y para una onda S:

$$\mathbf{T}_\alpha = \begin{pmatrix} \cos(q'_{T\alpha} \zeta_\alpha) & \sin(q'_{T\alpha} \zeta_\alpha) / q'_{T\alpha} \mu'_\alpha \\ -\sin(q'_{T\alpha} \zeta_\alpha) q'_{T\alpha} \mu'_\alpha & \cos(q'_{T\alpha} \zeta_\alpha) \end{pmatrix}. \quad (\text{N.11})$$

## Apéndice O

# Campo magnético en sistemas anisotrópicos lineales multicapas

Componentes del campo magnético en términos de las componentes eléctricas transversales  $E_1$  y  $E_2$ :

$$\begin{aligned}
 H_1(z) &= -\frac{dE_1(z)}{dz} \frac{i}{\omega} \left( \hat{\nu}_{12} + \frac{C_2 C_3}{C_1} \right) + \frac{dE_2(z)}{dz} \frac{i}{\omega} \left( \hat{\nu}_{11} - \frac{C_3^2}{C_1} \right) \\
 &\quad - \frac{E_1(z)}{\omega} \left( \kappa_2 \hat{\nu}_{13} + \frac{C_4 C_3}{C_1} \right) + \frac{E_2(z)}{\omega} \left( \kappa_1 \hat{\nu}_{13} - \frac{C_5 C_3}{C_1} \right); \\
 H_2(z) &= \frac{dE_1(z)}{dz} \frac{i}{\omega} \left( \frac{C_2^2}{C_1} - \hat{\nu}_{22} \right) + \frac{dE_2(z)}{dz} \frac{i}{\omega} \left( \hat{\nu}_{12} + \frac{C_2 C_3}{C_1} \right) \\
 &\quad + \frac{E_1(z)}{\omega} \left( \frac{C_4 C_2}{C_1} - \kappa_2 \hat{\nu}_{23} \right) + \frac{E_2(z)}{\omega} \left( \frac{C_5 C_2}{C_1} + \kappa_1 \hat{\nu}_{23} \right); \\
 H_3(z) &= -\frac{dE_1(z)}{dz} \frac{i}{\omega} \left( \hat{\nu}_{23} + \frac{C_2 C_9}{C_1} \right) + \frac{dE_2(z)}{dz} \frac{i}{\omega} \left( \hat{\nu}_{13} - \frac{C_3 C_9}{C_1} \right) \\
 &\quad - \frac{E_1(z)}{\omega} \left( \kappa_2 \hat{\nu}_{33} + \frac{C_4 C_9}{C_1} \right) + \frac{E_2(z)}{\omega} \left( \kappa_1 \hat{\nu}_{33} - \frac{C_5 C_9}{C_1} \right). \tag{O.1}
 \end{aligned}$$

Parámetros  $C_1$  to  $C_9$ :

$$\begin{aligned}
 C_1 &= \kappa_2^2 \hat{\nu}_{11} - 2\kappa_1 \kappa_2 \hat{\nu}_{12} + \kappa_1^2 \hat{\nu}_{22} - \omega^2 \left( \hat{\epsilon}_{33} + i \frac{\hat{\sigma}_{33}}{\omega} \right); \\
 C_2 &= \kappa_1 \hat{\nu}_{22} - \kappa_2 \hat{\nu}_{12}; \\
 C_3 &= \kappa_2 \hat{\nu}_{11} - \kappa_1 \hat{\nu}_{12}; \\
 C_4 &= \kappa_1 \kappa_2 \hat{\nu}_{23} - \kappa_2^2 \hat{\nu}_{13} - \omega^2 \left( \hat{\epsilon}_{13} + i \frac{\hat{\sigma}_{13}}{\omega} \right); \\
 C_5 &= \kappa_1 \kappa_2 \hat{\nu}_{13} - \kappa_1^2 \hat{\nu}_{23} - \omega^2 \left( \hat{\epsilon}_{23} + i \frac{\hat{\sigma}_{23}}{\omega} \right); \\
 C_6 &= \kappa_1 \kappa_2 \hat{\nu}_{33} + \omega^2 \left( \hat{\epsilon}_{12} + i \frac{\hat{\sigma}_{12}}{\omega} \right); \\
 C_7 &= \kappa_2^2 \hat{\nu}_{33} - \omega^2 \left( \hat{\epsilon}_{11} + i \frac{\hat{\sigma}_{11}}{\omega} \right); \\
 C_8 &= \kappa_1^2 \hat{\nu}_{33} - \omega^2 \left( \hat{\epsilon}_{22} + i \frac{\hat{\sigma}_{22}}{\omega} \right); \\
 C_9 &= \kappa_2 \hat{\nu}_{13} - \kappa_1 \hat{\nu}_{23}. \tag{O.2}
 \end{aligned}$$

## Apéndice P

# Forma lineal asociada al operador $L$ en doble capa de grafeno

La forma lineal asociada de este operador resulta:

$$\mathbf{A}(z) = \mathbf{B} \cdot \frac{d\Psi(z)}{dz} + \mathbf{P} \cdot \Psi(z). \quad (\text{P.1})$$

Calcularemos solo las formas lineales correspondientes a las soluciones LI en barreras dado que para el caso de los pozos simplemente tenemos que hacer  $V_0 = 0$  y sustituir  $k_{\ell b}$  por  $k_{\ell w}$ .

Para las soluciones LI de las barreras tendremos:

$$\mathbf{A}_{\ell b}(z) = \mathbf{B} \cdot \frac{d\Psi_{\ell b}(z)}{dz} + \mathbf{P} \cdot \Psi_{\ell b}(z), \quad (\text{P.2})$$

con

$$\Psi_{\ell b}(z) = \left| \begin{array}{c} \frac{\hbar^2}{2m}(\kappa_y + ik_{\ell b})^2 \\ E - V_0 \end{array} \right| e^{ik_{\ell b}z}; \quad \ell = 1, 2, 3, 4. \quad (\text{P.3})$$

En el problema que tratamos  $\mathbf{P} = \mathbf{Y}$  de acuerdo con el procedimiento de simetrización estándar, por tanto:

$$\mathbf{P} = \frac{\hbar^2}{2m}\kappa_y \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}. \quad (\text{P.4})$$

Sustituyendo en (P.2) los elementos correspondientes, después de acomodar los términos obtenemos que:

$$\mathbf{A}_{\ell b}(z) = \frac{\hbar^2}{2m} \left| \begin{array}{c} (E - V_0)(\kappa_y + ik_{\ell b}) \\ -\frac{\hbar^2}{2m}(k_{\ell b}^2 + \kappa_y^2)(\kappa_y + ik_{\ell b}) \end{array} \right| e^{ik_{\ell b}z}. \quad (\text{P.5})$$

Finalmente teniendo en cuenta las expresiones de los eigenvalores  $k_{\ell b}$  tendremos que:

$$\mathbf{A}_{\ell b}(z) = \left| \begin{array}{c} \frac{\hbar^2}{2m}(E - V_0)(\kappa_y + ik_{\ell b}) \\ -\frac{\hbar^2}{2m}(E - V_0)(\kappa_y + ik_{\ell b}) \end{array} \right| e^{ik_{\ell b}z}; \quad \ell = 1, 2, \quad (\text{P.6})$$

y

$$\mathbf{A}_{\ell b}(z) = \left| \begin{array}{c} \frac{\hbar^2}{2m}(E - V_0)(\kappa_y + ik_{\ell b}) \\ \frac{\hbar^2}{2m}(E - V_0)(\kappa_y + ik_{\ell b}) \end{array} \right| e^{ik_{\ell b}z}; \quad \ell = 3, 4. \quad (\text{P.7})$$

## Apéndice Q

# Determinante de la matriz $\mathbf{K}$ en doble capa de Grafeno

Escribamos la expresión para  $\mathbf{Q}(\mathbf{L} : z_2)$ :

$$\mathbf{Q}(\mathbf{L} : z_2) = \begin{pmatrix} \Psi_{01w} e^{ik_{1w}d_w} & \Psi_{04w} e^{ik_{4w}d_w} & \Psi_{02w} e^{ik_{2w}d_w} & \Psi_{03w} e^{ik_{3w}d_w} \\ \mathbf{A}_{01w} e^{ik_{1w}d_w} & \mathbf{A}_{04w} e^{ik_{4w}d_w} & \mathbf{A}_{02w} e^{ik_{2w}d_w} & \mathbf{A}_{03w} e^{ik_{3w}d_w} \end{pmatrix}, \quad (\text{Q.1})$$

en la forma:

$$\mathbf{Q}(\mathbf{L} : z_2) = \begin{pmatrix} \Psi_{01w} & \Psi_{04w} & \Psi_{02w} & \Psi_{03w} \\ \mathbf{A}_{01w} & \mathbf{A}_{04w} & \mathbf{A}_{02w} & \mathbf{A}_{03w} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} e^{ik_{1w}d_w} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{ik_{4w}d_w} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{ik_{2w}d_w} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{ik_{3w}d_w} \end{pmatrix}. \quad (\text{Q.2})$$

Si hacemos lo mismo con la matriz  $\mathbf{T}(z_3, z_2)$ :

$$\mathbf{T}(z_3, z_2) = \begin{pmatrix} \Psi_{01b} e^{ik_{1b}d_b} & \Psi_{04b} e^{ik_{4b}d_b} & \Psi_{02b} e^{ik_{2b}d_b} & \Psi_{03b} e^{ik_{3b}d_b} \\ \mathbf{A}_{01b} e^{ik_{1b}d_b} & \mathbf{A}_{04b} e^{ik_{4b}d_b} & \mathbf{A}_{02b} e^{ik_{2b}d_b} & \mathbf{A}_{03b} e^{ik_{3b}d_b} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \Psi_{01b} & \Psi_{04b} & \Psi_{02b} & \Psi_{03b} \\ \mathbf{A}_{01b} & \mathbf{A}_{04b} & \mathbf{A}_{02b} & \mathbf{A}_{03b} \end{pmatrix}^{-1}, \quad (\text{Q.3})$$

tendremos que:

$$\mathbf{T}(z_3, z_2) = \begin{pmatrix} \Psi_{01b} & \Psi_{04b} & \Psi_{02b} & \Psi_{03b} \\ \mathbf{A}_{01b} & \mathbf{A}_{04b} & \mathbf{A}_{02b} & \mathbf{A}_{03b} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} e^{ik_{1b}d_b} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{ik_{4b}d_b} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{ik_{2b}d_b} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{ik_{3b}d_b} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \Psi_{01b} & \Psi_{04b} & \Psi_{02b} & \Psi_{03b} \\ \mathbf{A}_{01b} & \mathbf{A}_{04b} & \mathbf{A}_{02b} & \mathbf{A}_{03b} \end{pmatrix}^{-1}. \quad (\text{Q.4})$$

Por otra parte para  $\mathbf{Q}(\mathbf{R} : z_3)$  tenemos que:

$$\mathbf{Q}(\mathbf{R} : z_3) = \begin{pmatrix} \Psi_{01w} & \Psi_{04w} & \Psi_{02w} & \Psi_{03w} \\ \mathbf{A}_{01w} & \mathbf{A}_{04w} & \mathbf{A}_{02w} & \mathbf{A}_{03w} \end{pmatrix}. \quad (\text{Q.5})$$

Luego, si planteamos:

$$\mathbf{K}_b = \mathbf{Q}(\mathbf{R} : z_3)^{-1} \cdot \mathbf{T}(z_3, z_2) \cdot \mathbf{Q}(\mathbf{L} : z_2), \quad (\text{Q.6})$$

y tenemos en cuenta que los eigenvalores aparecen por pares  $(k_{\ell b}, -k_{\ell b})$ ;  $(k_{\ell w}, -k_{\ell w})$  entonces es fácil comprobar que el determinante  $\text{Det} [\mathbf{K}_b] = 1$ . Además, de acuerdo con la regla de composición de la matrix de transferencia de coeficientes  $\mathbf{K}$  para un conjunto de barreras tendremos una multiplicación de matrices  $\mathbf{K}_b$ , por tanto el determinante de la matriz  $\mathbf{K}$  correspondiente a cualquier número de barreras también es 1.

# Notación

---

---

<b>B</b>	Coficiente matricial de la Ecuación Sturm-Liouville Matricial
<b>P</b>	Coficiente matricial de la Ecuación Sturm-Liouville Matricial
<b>Y</b>	Coficiente matricial de la Ecuación Sturm-Liouville Matricial
<b>W</b>	Coficiente matricial de la Ecuación Sturm-Liouville Matricial
<b>C</b>	Matriz que representa el término $i(\mathbf{P} + \mathbf{Y})$
<b>F</b>	Solución de la ecuación Sturm-Liouville matricial
<b>L</b>	Operador Sturm-Liouville matricial
<b>A</b>	Forma lineal asociada al operador <b>L</b>
<b>G</b>	Función de Green
<b>M</b>	Matriz de transferencia completa
<b>T</b>	Matriz de transferencia asociada
<b>K</b>	Matriz de transferencia de coeficientes
<b>E</b>	Matriz de rigidez (stiffness matrix <i>en inglés</i> )
<b>L<sub>c</sub></b>	Matriz de admitancia (compliance matrix <i>en inglés</i> )
<b>S</b>	Matriz de dispersión (Scattering <i>en inglés</i> )
<b>H</b>	Matriz híbrida compliance-stiffness o simplemente matriz híbrida
$r_c$	Coficiente de reflexión de amplitudes
$R_c$	Reflectancia
$t_c$	Coficiente de transmisión de amplitudes
$T_c$	Transmitancia
$G_b$	Conductancia balística
$\Omega - d$	Se refiere a la degradación numérica conocida como problema $\Omega - d$
$\vec{H}$	Intensidad del campo magnético
$\vec{E}$	Intensidad del campo eléctrico
$\vec{B}$	Densidad de flujo magnético
$\vec{D}$	Vector el desplazamiento eléctrico
$\vec{j}$	Vector densidad de corriente eléctrica
$\hat{\epsilon}$	Tensor permitividad
$\hat{\mu}$	Tensor permeabilidad magnética
$\hat{\nu}$	Inverso del tensor permeabilidad magnética $\hat{\mu}$
$\hat{\sigma}$	Tensor conductividad eléctrica

# Lista de Tablas

1.1	Algunos casos típicos de sistemas de ecuaciones diferenciales de segundo orden que siguen el patrón Sturm-Liouville matricial. Tomado de [8]. La amplitud $\mathbf{F}$ y la forma diferencial lineal $\mathbf{A}$ se muestran explícitamente para los casos estudiados en [8]. . . . .	16
2.1	SMM1, SMM2, SMM3, <i>Modelo matemático simple</i> con $N = 1, 2, 3$ , respectivamente. TH, <i>transversal horizontal</i> . MFP, <i>Modelo Fenomenológico completo</i> para modos ópticos polares de onda larga. Casos especiales, <i>Material transversalmente isotrópico, material tetragonal y cúbico</i> . EFA, <i>Aproximación de la función envolvente</i> . . . . .	27
5.1	Propiedades de los materiales piezoeléctricos PZT4 (A) y PZT5A (B). . . . .	78
5.2	Comparación entre los valores de velocidad superficial de la onda TH obtenidos para diferentes frecuencias por dos métodos teóricos diferentes: ( <b>MMG</b> ) <i>Método de la matriz GLobal</i> y ( <b>SVD</b> ) <i>Técnica de descomposición del valor singular</i> . ( <b>H</b> ) <i>Método de la matriz híbrida</i> . . . . .	81
5.3	Ejemplo de inestabilidad numérica de la matriz $\mathbf{K}$ para un sistema de doble barrera en DCG. Intervalo de energía $0 < E < 0.05$ eV y ángulo de incidencia $-90^\circ < \varphi_0 < 90^\circ$ . Ancho de barreras y pozos $d_b = d_w = 30$ nm; $V_0 = 50$ meV. $T_c(\mathbf{K})$ transmitancia en términos de $\mathbf{K}$ . $T_c(\mathbf{H}) / T_c(\mathbf{S})$ transmitancia en términos de $\mathbf{H}/\mathbf{S}$ . $ \text{Det}[\mathbf{K}]  /  \text{Det}[\mathbf{H}] $ módulo del determinante de la matriz $\mathbf{K}/\mathbf{H}$ . . . . .	117

# Lista de Figuras

1.1	Esquema general de una heteroestructura compuesta de $\mu$ capas empareadas entre dos dominios externos semi-infinitos: L (a la izquierda) and R (a la derecha). De acuerdo con nuestra convención, la capa $m$ está limitada por las intercaras ( $m-1$ ) y $m$ con coordenadas $z_{m-1}$ y $z_m$ respectivamente. . . . .	14
1.2	Descripción simplificada de una heteroestructura. Configuración L – M – R donde el dominio intermedio M puede ser una simple capa o un compuesto. . . . .	19
2.1	Esquema de una heteroestructura compuesta por tres materiales Magneto-electro-elásticos dibujado en [44] para el estudio de modos Magneto-electro-elásticos. En el extremo superior derecho hemos indicado, adicionalmente, la orientación de nuestro sistema de ejes coordenados. . . . .	43
2.2	Representación unidimensional de una heterounión formada por dos semiconductores A y B perfectamente acoplados en términos de un borde de banda de conducción dependiente de la posición. . . . .	45
3.1	Descripción simplificada de una heteroestructura. Configuración L – M – R donde el dominio intermedio M puede ser una simple capa o un compuesto. Se indican las coordenadas $z_L$ y $z_R$ de las intercaras que empalman a M con los dominios externos L y R así como la coordenada arbitraria $z_0/z_f$ en el dominio externo L/R. . . . .	62
5.1	Esquema general del sistema piezoeléctrico bajo estudio. Se indican las coordenadas $z_L$ y $z_R$ de las intercaras que empalman la región interna compuesta de $m$ capas con los dominios externos (semi-infinitos) compuestos de material A. . . . .	73
5.2	Determinación de la velocidad superficial a $\omega = 20$ MHz utilizando la matriz de transferencia asociada. Sistema $m = 9$ (A-BABABAB-A). La velocidad así determinada es $v_s = 2339.4$ m/s. . . . .	78
5.3	Determinación de la velocidad superficial a $\omega = 80$ MHz utilizando la matriz de transferencia asociada. Sistema $m = 9$ (A-BABABAB-A). Las velocidades así determinadas son $v_s = 2313.96$ m/s y $v_s = 2335.12$ m/s. . . . .	78
5.4	Inestabilidad numérica de la matriz de transferencia asociada manifestada gráficamente a $\omega = 200$ MHz. Sistema $m = 9$ (A-BABABAB-A). . . . .	79
5.5	Determinación de la velocidad superficial a $\omega = 200$ MHz utilizando el método de la matriz híbrida. Sistema $m = 9$ (A-BABABAB-A). Las velocidades así determinadas son $v_s = 2299.66$ m/s, $v_s = 2303.13$ m/s, $v_s = 2308.33$ m/s y $v_s = 2313.84$ m/s. . . . .	80
5.6	Determinación de la velocidad superficial a $\omega = 400$ MHz utilizando el método de la matriz híbrida. Sistema $m = 9$ (A-BABABAB-A). Se observan la primera banda de modos pares y la primera banda de modos impares, cada una con cuatro valores de $v_s$ . . . . .	80



5.7	Curvas de dispersión para los sistemas $m = 3$ (A-B-A) y $m = 9$ (A-BABABAB-A) obtenidas utilizando el método de la matriz híbrida. Se muestran la primera banda de modos pares y la primera banda de modos impares. . . . .	81
5.8	Esquema general de un cristal fonónico unidimensional. . . . .	83
5.9	Factor de localización de ondas P y S que se propagan en la dirección normal en un cristal fonónico ordenado. . . . .	92
5.10	Factor de localización de una onda P que incide bajo un ángulo de $40^\circ$ en un cristal fonónico ordenado ( $\delta = 0.0$ ) y en uno desordenado ( $\delta = 0.05$ ). El cálculo fue realizado utilizando la matriz de dispersión $\mathbf{S}$ y la matriz de transferencia asociada $\mathbf{T}$ . . . . .	92
5.11	Coincidencia de los espectros de transmitancia calculados utilizando la matriz híbrida ( $\mathbf{H}$ ), la matriz de dispersión ( $\mathbf{S}$ ) y una matriz Global ( $\mathbf{MG}$ ). Sistema ordenado compuesto de $m = 18$ celdas unitarias. La onda P incide bajo un ángulo $\theta = 40^\circ$ . . . . .	93
5.12	Espectro de transmitancia de una onda P que incide bajo un ángulo $\theta = 40^\circ$ en un cristal fonónico desordenado ( $m = 18$ ), calculado utilizando la matriz de dispersión ( $\mathbf{S}$ ). . . . .	94
5.13	Espectro de transmitancia de una onda P que incide bajo un ángulo $\theta = 40^\circ$ en un cristal fonónico ordenado con $m = 10$ , calculado utilizando tres matrices: la matriz de dispersión ( $\mathbf{S}$ ), la matriz de transferencia asociada ( $\mathbf{T}$ ) y la matriz híbrida $\mathbf{H}$ . Se incluye el determinante de $\mathbf{T}$ . . . . .	95
5.14	Espectro de transmitancia de una onda P que incide bajo un ángulo $\theta = 40^\circ$ en un cristal fonónico ordenado con $m = 18$ , calculado utilizando tres matrices: la matriz de dispersión ( $\mathbf{S}$ ), la matriz de transferencia asociada ( $\mathbf{T}$ ) y la matriz híbrida $\mathbf{H}$ . La degradación numérica de la matriz ( $\mathbf{T}$ ) se manifiesta en algunos intervalos de frecuencia. . . . .	95
5.15	Espectro de transmitancia de una onda P que incide bajo un ángulo $\theta = 70^\circ$ en un cristal fonónico ordenado con $m = 10$ , calculado utilizando la matriz de dispersión ( $\mathbf{S}$ ) y la matriz de transferencia asociada ( $\mathbf{T}$ ). Se observa la usual degradación numérica de la matriz ( $\mathbf{T}$ ). . . . .	96
5.16	Esquema general de una microcavidad Fabry-Pérot. Se indican los espejos de Bragg, sus pares de capas alternas y la microcavidad. La heteroestructura está acoplada por la derecha a un substrato de Silicio cristalino (Si-c). . . . .	100
5.17	Espectro de reflectancia de una microcavidad Fabry-Pérot calculado a un ángulo de incidencia $\theta = 20^\circ$ para la componente eléctrica $E_1$ (círculos cerrados) y para $E_2$ (círculos abiertos), y a $\theta = 25^\circ$ para la componente $E_2$ (línea + círculos abiertos). El ángulo azimutal $\varphi = 0^\circ$ . . . . .	104
5.18	Espectro de reflectancia de una microcavidad Fabry-Pérot calculado a un ángulo de incidencia $\theta = 20^\circ$ para la componente eléctrica $E_1$ en términos de la matriz de transferencia asociada $\mathbf{T}$ y en términos de la matriz híbrida. El ángulo azimutal $\varphi = 0^\circ$ . . . . .	104
5.19	Espectro de reflectancia de un EFSP calculado para dos casos: 1) Despreciando la absorción del Silicio poroso y utilizando la matriz $\mathbf{T}(z_R, z_L)$ (línea continua). 2) Considerando la absorción, utilizando la matriz $\mathbf{H}(z_R, z_L)$ (línea discontinua) y utilizando la matriz $\mathbf{T}(z_R, z_L)$ (círculos abiertos). . . . .	106
5.20	Perfil de potencial electrostático para una doble capa de Grafeno. Se muestra la altura de las barreras $V_0$ , su ancho ( $d_b$ ), así como el de los pozos ( $d_w$ ). El ángulo de incidencia ( $\varphi_0$ ) es medido con respecto a la normal (que yace en el plano $yz$ ) a la intercara pozo-barrera. Se indican además los dominios externos L y R. . . . .	108
5.21	Transmitancia ( $T_c$ ) como función de la energía de los electrones incidentes ( $E$ ) para un sistema de dos barreras de potencial en DCG; $d_b = d_w = 10$ nm, $V_0 = 50$ meV. (a) Resultados obtenidos en [83] mediante una matriz de transferencia de coeficientes. (b) Nuestros resultados en términos de la matriz $\mathbf{H}$ . Trazo color negro, para $\varphi_0 = 0^\circ$ ; trazo azul, para $\varphi_0 = 5^\circ$ ; trazo rojo, para $\varphi_0 = 10^\circ$ y trazo color verde, para $\varphi_0 = 30^\circ$ . . . . .	116

- 5.22 Comparación del espectro de transmitancia obtenido en términos de la matriz  $\mathbf{H}$ , de la matriz  $\mathbf{S}$  y de  $\mathbf{K}$  para el ángulo de incidencia  $\varphi_0 = 10^\circ$ . Sistema de dos barreras de potencial en DCG,  $d_b = d_w = 10$  nm,  $V_0 = 50$  meV. . . . . 117
- 5.23 Diagrama de contorno  $(E, \varphi_0)$  en términos de  $\mathbf{K}$  para un sistema de dos barreras en DCG. La escala de colores indica valores de Transmitancia. Altura de las barreras  $V_0 = 50$  meV;  $d_b = d_w = 10$  nm. El módulo del determinante ( $|\text{Det} [\mathbf{K}]| = 1$ ) como predice el cálculo algebraico. . . . . 118
- 5.24 Diagrama de contorno  $(E, \varphi_0)$  en términos de  $\mathbf{H}$  para un sistema de dos barreras en DCG. La escala de colores indica valores de Transmitancia. Altura de las barreras  $V_0 = 50$  meV;  $d_b = d_w = 30$  nm. El módulo del determinante ( $|\text{Det} [\mathbf{H}]| = 1$ ). . . . . 118
- 5.25 Transmitancia como función de la energía de los electrones incidentes ( $E$ ) para anchos  $d_b = d_w = 10$  nm;  $V_0 = 50$  meV y ángulo de incidencia  $\varphi_0 = 2.5^\circ$ . (a) sistema de 4 barreras de potencial. (b) sistema de 8 barreras de potencial. . . . . 119
- 5.26 Módulo del determinante de las matrices  $\mathbf{K}$  y  $\mathbf{H}$  como función de la energía de los electrones incidentes ( $E$ ) para sistema de cuatro barreras de potencial; anchos  $d_b = d_w = 10$  nm;  $V_0 = 50$  meV y ángulo de incidencia  $\varphi_0 = 2.5^\circ$ . . . . . 120
- 5.27 Transmitancia como función de la energía de los electrones incidentes ( $E$ ) para un sistema de cuatro barreras con  $d_b = d_w = 10$  nm; ángulo de incidencia  $\varphi_0 = 2.5^\circ$ . (a)  $V_0 = 50$  meV. (b)  $V_0 = 100$  meV. . . . . 121

# Bibliografía

- [1] G. Bastard. *Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures*. Éditions de Physique, Paris, 1989.
- [2] C. Trallero-Giner, R. Pérez-Alvarez, and F. García-Moliner. *Long wave polar modes in semiconductor heterostructures*. Pergamon Elsevier Science, Oxford GB, 1st edition, April 1998.
- [3] G. Bonnet. Orthotropic elastic media having a closed form expression of the Green tensor. *International Journal of Solids and Structures*, 46(5):1240 – 1250, 2009.
- [4] Xiangyong Li and Minzhong Wang. Three-dimensional Green's functions for infinite anisotropic piezoelectric media. *International Journal of Solids and Structures*, 44(5):1680 – 1684, 2007.
- [5] Jiangyi Chen, E. Pan, and Hualing Chen. Wave propagation in magneto-electro-elastic multilayered plates. *International Journal of Solids and Structures*, 44(34):1073 – 1085, 2007.
- [6] F. Tisseur and K. Meerbergen. The Quadratic Eigenvalue Problem. *SIAM Review*, 43(2):235–286, 2001.
- [7] G. Bastard and J. A. Brum. Electronic states in semiconductor heterostructures. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 22(9):1625–1644, 1986.
- [8] R. Pérez-Álvarez and F. García-Moliner. *Transfer Matrix, Green Function and related techniques: Tools for the study of multilayer heterostructures*. Universitat Jaume I, Castellón de la Plana, Spain, 2004.
- [9] F. García-Moliner and Víctor R. Velasco. *Theory of Single and Multiple Interfaces*. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd, Singapore, 1992.
- [10] J. M. Luttinger and W. Kohn. Motion of Electrons and Holes in Perturbed Periodic Fields. *Phys. Rev.*, 97:869–883, 1955.
- [11] W. Pötz, W. Porod, and D. K. Ferry. Theoretical study of subband levels in semiconductor heterostructures. *Phys. Rev. B*, 32:3868–3875, 1985.
- [12] U. Rössler. Nonparabolicity and warping in the conduction band of GaAs. *Solid State Communications*, 49(10):943 – 947, 1984.
- [13] P.A. Mello, P. Pereyra, and N. Kumar. Macroscopic approach to multichannel disordered conductors. *Annals of Physics*, 181(2):290 – 317, 1988.
- [14] Pedro Pereyra. Non-commutative polynomials and the transport properties in multichannel-multilayer systems. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 31(19):4521, 1998.
- [15] M.J.S. Lowe. Matrix techniques for modeling ultrasonic waves in multilayered media. *IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control*, 42(4):525–542, July 1995.

- [16] Eng Leong Tan. Hybrid compliance-stiffness matrix method for stable analysis of elastic wave propagation in multilayered anisotropic media. *The Journal of the Acoustical Society of America*, 119(1):45–53, 2006.
- [17] Eng Leong Tan. Matrix algorithms for modeling acoustic waves in piezoelectric multilayers. *Ultrasonics, Ferroelectrics and Frequency Control, IEEE Transactions on*, 54(10):2016–2023, 2007.
- [18] Victor Y. Zhang and Vincent Laude. Unified and stable scattering matrix formalism for acoustic waves in piezoelectric stacks. *Journal of Applied Physics*, 104(6):064916–1–064916–7, 2008.
- [19] H. Calas, R. Rodriguez-Ramos, J. A. Otero, L. Leija, A. Ramos, and G. Monsivais. Dispersion curves of shear horizontal wave surface velocities in multilayer piezoelectric systems. *Journal of Applied Physics*, 107(4):044511–1–044511–9, 2010.
- [20] A. Messina and E. Carrera. Three-dimensional free vibration of multi-layered piezoelectric plates through approximate and exact analyses. *Journal of Intelligent Material Systems and Structures*, 26(5):489–504, 2014.
- [21] J.M. Luque-Raigon, J. Halme, and H. Miguez. Fully stable numerical calculations for finite one-dimensional structures: Mapping the transfer matrix method. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 134:9–20, 2014.
- [22] A. Kamal and V. Giurgiutiu. Stiffness transfer matrix method (STMM) for stable dispersion curves solution in anisotropic composites. *Proceedings of SPIE - The International Society for Optical Engineering*, 9064, 2014.
- [23] C. Jirauschek and T. Kubis. Modeling techniques for quantum cascade lasers. *Applied Physics Reviews*, 1(1), 2014.
- [24] A. Kamal, M. Gresil, and V. Giurgiutiu. Comparative study of several methods for the calculation of ultrasonic guided waves in composites. *54th AIAA/ASME/ASCE/AHS/ASC Structures, Structural Dynamics, and Materials Conference*, 2013.
- [25] Nicholas J. Higham. *Accuracy and Stability of Numerical Algorithms*. Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, PA, USA, 2nd edition, 2002.
- [26] A.K. Mal. Wave propagation in layered composite laminates under periodic surface loads. *Wave Motion*, 10(3):257 – 266, 1988.
- [27] B. Friedman. *Principles and techniques of applied mathematics*. J Wiley, New York, 1956.
- [28] L. Wang and S.I. Rokhlin. Stable reformulation of transfer matrix method for wave propagation in layered anisotropic media. *Ultrasonics*, 39(6):413 – 424, 2001.
- [29] S. I. Rokhlin and L. Wang. Stable recursive algorithm for elastic wave propagation in layered anisotropic media: Stiffness matrix method. *The Journal of the Acoustical Society of America*, 112(3):822–834, 2002.
- [30] B. Collet. Recursive surface impedance matrix methods for ultrasonic wave propagation in piezoelectric multilayers. *Ultrasonics*, 42(19):189 – 197, 2004. Proceedings of Ultrasonics International 2003.
- [31] Eng Leong Tan. Stiffness matrix method with improved efficiency for elastic wave propagation in layered anisotropic media. *The Journal of the Acoustical Society of America*, 118(6), 2005.
- [32] Eng Leong Tan. Generalized eigenproblem of hybrid matrix for floquet wave propagation in one-dimensional phononic crystals with solids and fluids. *Ultrasonics*, 50(1):91 – 98, 2010.
- [33] Eng Leong Tan. A concise and efficient scattering matrix formalism for stable analysis of elastic wave propagation in multilayered anisotropic solids. *Ultrasonics*, 41(3):229 – 236, 2003.

- [34] A.A. Shcherbakov, A.V. Tishchenko, D.S. Setz, and B.C. Krummacher. Rigorous s-matrix approach to the modeling of the optical properties of {OLEDs}. *Organic Electronics*, 12(4):654 – 659, 2011.
- [35] R. Pérez-Álvarez, H. Rodríguez-Coppola, V. R. Velasco, and F. García-Moliner. A study of the matching problem using transfer matrices. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 21(11):2197, 1988.
- [36] V. Hurewicz. *Lectures on ordinary differential equations*. The MIT Press, Cambridge, Massachusetts, 1958.
- [37] Yu.N. Bibikov. *General course on ordinary differential equations (in Russian)*. Leningrad University Press, 1981.
- [38] Siegfried Flügge. *Practical Quantum Mechanics (Classics in mathematics)*. Springer Berlin Heidelberg, 1994.
- [39] Alberto Galindo and Pedro Pascual. *Quantum Mechanics I*. Springer Berlin Heidelberg, 1990.
- [40] Stephen Barnett. *Matrices: Methods and applications*. Oxford University Press, New York, 1990.
- [41] E. Dieulesaint and D. Royer. *Elastic waves in solids*, volume I. J Wiley, New York, 1980.
- [42] D. A. Broido and L. J. Sham. Effective masses of holes at GaAs-AlGaAs heterojunctions. *Phys. Rev. B*, 31:888–892, 1985.
- [43] YongQiang Guo, WeiQiu Chen, and YongLiang Zhang. Guided wave propagation in multilayered piezoelectric structures. *Science in China Series G: Physics, Mechanics and Astronomy*, 52(7):1094–1104, 2009.
- [44] H. Calas, J.A. Otero, R. Rodríguez-Ramos, G. Monsivais, and C. Stern. Dispersion relations for SH wave in magneto-electro-elastic heterostructures. *International Journal of Solids and Structures*, 45(20):5356 – 5367, 2008.
- [45] L. Schwartz. *Mathematical methods for physical sciences (in French)*. Hermann, Paris, 1965.
- [46] D. J. BenDaniel and C. B. Duke. Space-charge effects on electron tunneling. *Phys. Rev.*, 152:683–692, Dec 1966.
- [47] E. Dieulesaint and D. Royer. *Elastic waves in solids*, volume I. J Wiley, New York, 1980. Fig.3.14.
- [48] Jiang Yu Li and Martin L. Dunn. Micromechanics of magneto-electro-elastic composite materials: Average fields and effective behavior. *Journal of Intelligent Material Systems and Structures*, 9(6):404–416, 1998.
- [49] Kuzhichalil P Jayachandran, Jose M Guedes, and Helder C Rodrigues. A generic homogenization model for magneto-electric multiferroics. *Journal of Intelligent Material Systems and Structures*, 25(10):1243–1255, 2014.
- [50] Marvin L. Cohen and James R. Chelikowsky. *Pseudopotentials*, volume 75 of *Springer Series in Solid-State Sciences*. Springer Berlin Heidelberg, 1988.
- [51] Manuel Cardona Peter Y. Yu. *2.5 Band Structure Calculations by Pseudopotential Methods*, volume Fourth Edition of *Graduate Texts in Physics*. Springer Berlin Heidelberg, 2010.
- [52] Marvin L. Cohen and T. K. Bergstresser. Band structures and pseudopotential form factors for fourteen semiconductors of the diamond and zinc-blende structures. *Phys. Rev.*, 141:789–796, Jan 1966.
- [53] M Jaros and K B Wong. New electron states in gaas-ga x al 1-x as superlattice. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 17(29):L765, 1984.

- [54] M. Jaros, K. B. Wong, and M. A. Gell. Electronic structure of  $\text{GaAs-Ga}_{1-x}\text{Al}_x$  as quantum well and sawtooth superlattices. *Phys. Rev. B*, 31:1205–1207, Jan 1985.
- [55] R. de L. Kronig and W. G. Penney. Quantum mechanics of electrons in crystal lattices. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A*, 130(814):499–513, 1931.
- [56] Frank Szmulowicz. Kronig - penney model: a new solution. *European Journal of Physics*, 18(5):392, 1997.
- [57] Frank Szmulowicz. New kronig-penney equation emphasizing the band edge conditions. *European Journal of Physics*, 29(3):507, 2008.
- [58] Jeffrey L. Bleustein. A new surface wave in piezoelectric materials. *Applied Physics Letters*, 13(12), 1968.
- [59] C. Maerfeld and P. Tournois. Pure shear elastic surface wave guided by the interface of two semi-infinite media. *Applied Physics Letters*, 19(4), 1971.
- [60] R. Rodríguez-Ramos, G. Monsivais, J. A. Otero, H. Calás, V. Guerra, and C. Stern. Presence of stark ladders in scattering of shear horizontal piezoelectric waves. *Journal of Applied Physics*, 96(2), 2004.
- [61] G. Monsivais, J. Otero, and H. Calás. Surface and shear horizontal waves in piezoelectric composites. *Phys. Rev. B*, 71:064101, Feb 2005.
- [62] Zheng-Hua Qian, Feng Jin, Tianjian Lu, and Kikuo Kishimoto. Transverse surface waves in a layered structure with a functionally graded piezoelectric substrate and a hard dielectric layer. *Ultrasonics*, 49(3):293 – 297, 2009.
- [63] Jianke Du, Kai Xian, Ji Wang, and Yook-Kong Yong. Love wave propagation in piezoelectric layered structure with dissipation. *Ultrasonics*, 49(2):281 – 286, 2009.
- [64] Shi Chen, Shuyu Lin, and Zhaohong Wang. The viscous effects on shear horizontal surface acoustic waves in semi-infinite superlattices. *Ultrasonics*, 51(1):29 – 33, 2011.
- [65] Zuwei Zhang, Zhiyu Wen, and Chunmei Wang. Investigation of surface acoustic waves propagating in  $\text{ZnO/SiO}_2$  multilayer structure. *Ultrasonics*, 53(2):363 – 368, 2013.
- [66] Gang Wang, Dianlong Yu, Jihong Wen, Yaozong Liu, and Xisen Wen. One-dimensional phononic crystals with locally resonant structures. *Physics Letters A*, 327(56):512 – 521, 2004.
- [67] A.-Li Chen and Yue-Sheng Wang. Study on band gaps of elastic waves propagating in one-dimensional disordered phononic crystals. *Physica B: Condensed Matter*, 392(12):369 – 378, 2007.
- [68] R. Martinez-Sala, J. Sancho, J. V. Sanchez, V. Gomez, J. Llinares, and F. Meseguer. Sound attenuation by sculpture. *Nature*, 378(6554):241–241, 1995.
- [69] Alan Wolf, Harry L. Swinney Jack B. Swift, and John A. Vastano. Determining lyapunov exponents from a time series. *Physica 16D*, pages 285–317, 1985.
- [70] M. P. Castanier and C. Pierre. Lyapunov exponents and localization phenomena in multi-couple nearly periodic systems. *Journal of Sound and Vibration*, 183(3):493–515, 1995.
- [71] G.J.Kissel. Localization factor for multichannel disordered systems. *Physical Review A*, 44(2):1008–1014, 1991.
- [72] A-Li Chen, Yue-Sheng Wang, and Zheng-Dao Wang Ya-Fang Guo. Band structures of fibonacci phononic quasicrystals. *Solid State Commun.*, 145:103–108, 2008.
- [73] Kazuaki SAKODA. Optics of photonic crystals. *Optical Review*, 6(5):381–392, 1999.

- [74] J. E. Lugo, H. A. Lopez, S. Chan, and P. M. Fauchet. Porous silicon multilayer structures: A photonic band gap analysis. *Journal of Applied Physics*, 91(8), 2002.
- [75] P. J. Reece, G. Lrondel, W. H. Zheng, and M. Gal. Optical microcavities with subnanometer linewidths based on porous silicon. *Applied Physics Letters*, 81(26), 2002.
- [76] R. Nava, M. B. de la Mora, J. Tagüeña Martínez, and J. A. del Río. Refractive index contrast in porous silicon multilayers. *physica status solidi (c)*, 6(7):1721–1724, 2009.
- [77] D. Estrada-Wiese, J.A. del Ro, and M.B. de la Mora. Heat transfer in photonic mirrors. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, 25(10):4348–4355, 2014.
- [78] O.A. Aktsipetrov, T.V. Dolgova, I.V. Soboleva, and A.A. Fedyanin. Anisotropic photonic crystals and microcavities based on mesoporous silicon. *Physics of the Solid State*, 47(1):156–158, 2005.
- [79] D. Kovalev, G. Polisski, J. Diener, H. Heckler, N. Knzner, V. Yu. Timoshenko, and F. Koch. Strong in-plane birefringence of spatially nanostructured silicon. *Applied Physics Letters*, 78(7), 2001.
- [80] M.B. de la Mora, O.A. Jaramillo, R. Nava, and J. Tag. Viability study of porous silicon photonic mirrors as secondary reflectors for solar concentration systems. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 93(8):1218 – 1224, 2009.
- [81] Heinrich Diesinger, Ahmad Bsiesy, and Roland Hérino. In situ measurement of the optical absorption coefficient of porous silicon. *Journal of Applied Physics*, 89(1), 2001.
- [82] M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, and A. K. Geim. Chiral tunnelling and the klein paradox in graphene. *Nat Phys*, 2:620–625, 2006.
- [83] S. Mukhopadhyay, R. Biswas, and C. Sinha. Tunable fano resonances in the ballistic transmission and tunneling lifetime in a biased bilayer graphene nanostructure. *Physics Letters A*, 375:2921–2927, 2011.
- [84] S. Mukhopadhyay, R. Biswas, and C. Sinha. Signature of quantum interference and the fano resonances in the transmission spectrum of bilayer graphene nanostructure. *Journal of Applied Physics*, 110(1):014306–1–014306–7, 2011.
- [85] Mikito Koshino. Electronic transport in bilayer graphene. *New Journal of Physics*, 11(9):095010, 2009.
- [86] S. V. Morozov, K. S. Novoselov, M. I. Katsnelson, F. Schedin, D. C. Elias, J. A. Jaszczak, and A. K. Geim. Giant intrinsic carrier mobilities in graphene and its bilayer. *Phys. Rev. Lett.*, 100:016602, Jan 2008.
- [87] M. Ramezani Masir, P. Vasilopoulos, and F. M. Peeters. Tunneling, conductance, and wavevector filtering through magnetic barriers in bilayer graphene. *Phys. Rev. B*, 79:035409, Jan 2009.
- [88] Yuanbo Zhang, Tsung-Ta Tang, Caglar Girit, Zhao Hao, Michael C. Martin, Alex Zettl, Michael F. Crommie, Y. Ron Shen, and Feng Wang. Direct observation of a widely tunable bandgap in bilayer graphene. *Nature*, 459:820–823, Jun 2009.
- [89] Andrey E. Miroschnichenko, Sergej Flach, and Yuri S. Kivshar. Fano resonances in nanoscale structures. *Rev. Mod. Phys.*, 82:2257–2298, Aug 2010.
- [90] Boris Luk’yanchuk, Nikolay I. Zheludev, Stefan A. Maier, Naomi J. Halas, Peter Nordlander, Harald Giessen, and Chong Tow Chong. The fano resonance in plasmonic nanostructures and metamaterials. *Nat Mater*, 9:707–715, 2010.
- [91] Jeroen B. Oostinga, Hubert B. Heersche, Xinglan Liu, Alberto F. Morpurgo, and Lieven M. K. Vandersypen. Gate-induced insulating state in bilayer graphene devices. *Nat Mater*, 7:151–157, 2008.

- [92] J. A. Briones Torres. *El rol de las resonancias Fano en las propiedades de transmisión y transporte en superredes de doble capa de grafeno. Tesis para obtener el grado de Maestro en Ciencias Físicas.* Universidad Autónoma de Zacatecas, jun 2014.
- [93] Chunxu Bai and Xiangdong Zhang. Klein paradox and resonant tunneling in a graphene superlattice. *Phys. Rev. B*, 76:075430, Aug 2007.
- [94] M. Büttiker. Four-terminal phase-coherent conductance. *Phys. Rev. Lett.*, 57:1761–1764, Oct 1986.
- [95] E. McCann and V. I. Fal'Ko. Landau-Level Degeneracy and Quantum Hall Effect in a Graphite Bilayer. *Physical Review Letters*, 96(8):086805, March 2006.
- [96] F. Guinea, A. H. Castro Neto, and N. M. R. Peres. Electronic states and landau levels in graphene stacks. *Phys. Rev. B*, 73:245426, Jun 2006.
- [97] Edward McCann, David S.L. Abergel, and Vladimir I. Falko. Electrons in bilayer graphene. *Solid State Communications*, 143(12):110 – 115, 2007. Exploring graphene Recent research advances.
- [98] Edward McCann and Mikito Koshino. The electronic properties of bilayer graphene. *Reports on Progress in Physics*, 76(5):056503, 2013.
- [99] K. S. Novoselov, E. McCann, S. V. Morozov, V. I. Fal'ko, M. I. Katsnelson, U. Zeitler, D. Jiang, F. Schedin, and A. K. Geim. Unconventional quantum hall effect and berry/'s phase of  $2\pi$  in bilayer graphene. *Nat Phys*, 2:177–180, 2006.
- [100] A. K. Geim and K. S. Novoselov. The rise of graphene. *Nat Mater*, 6(3):183–191, march 2007.
- [101] S. Mukhopadhyay, R. Biswas, and C. Sinha. Resonant tunnelling in a fibonacci bilayer graphene superlattice. *physica status solidi (b)*, 247(2):342–346, 2010.