La Serie Universitaria de la Fundación Juan March presenta resúmenes, realizados por el propio autor, de algunos estudios e investigaciones llevados a cabo por los becarios de la Fundación y aprobados por los Asesores Secretarios de los distintos Departamentos.

El texto íntegro de las Memorias correspondientes se encuentra en la Biblioteca de la Fundación (Castelló, 77. Madrid-6).

La lista completa de los trabajos aprobados se presenta, en forma de fichas, en los Cuadernos Bibliográficos que publica la Fundación Juan March.

Los trabajos publicados en Serie Universitaria abarcan las siguientes especialidades: Arquitectura y Urbanismo; Artes Plásticas; Biología; Ciencias Agrarias; Ciencias Sociales; Comunicación Social; Derecho; Economía; Filosofía; Física; Geología; Historia; Ingeniería; Literatura y Filología; Matemáticas; Medicina, Farmacia y Veterinaria; Música; Química; Teología. A ellas corresponden los colores de la cubierta.

Edición no venal de 300 ejemplares que se reparte gratuitamente a investigadores, Bibliotecas y Centros especializados de toda España. SERIE UNIVERSITARIA SERIE UNIVERSITARIA Fundación Juan March-

Víctor Ramón Velasco Rodríguez

Propiedades dinámicas y termodinámicas de superficies de sólidos



Fundación Juan March



Juan March

d

FJM-Uni 165-Vel Propiedades dinámicas y termodin Velasco Rodríguez, Víctor Ramón. 1055909



Biblioteca FJM



Víctor Ramón Velasco Rodríguez

Propiedades dinámicas y termodinámicas de superficies de sólidos



Fundación Juan March Castelló, 77. Teléf. 225 44 55 Madrid - 6

Este trabajo fue realizado con una Beca de la Convocatoria de España, 1979, individual Departamento de FISICA Centro de Trabajo: Instituto de Física del Estado Sólido del C.S.I.C. Facultad de Ciencias de la Universidad Autónoma, Madrid.

Los textos publicados en esta Serie Universitaria son elaborados por los propios autores e impresos por reproducción fotostática.

Depósito Legal: M - 31422 - 1981 LS.B.N.: 84 - 7075 - 217 - 0 Impresión: Gráficas Ibérica. Tarragona, 34, Madrid-7

INDICE

		Página
INTRODUCCION		5
CAPITULO 1: PROPIEDADES D	DINAMICAS Y TERMODINAMICA'S DE	
ONDAS ELASTICAS DE S	UPERFICIE EN CRISTALES CUBICOS	7
1.1. Introducción		7
1.2. Estudio de la superfic	cie (001)	9
1.3. Termodinámica de la	superficie (001)	13
1.4. Análisis de experimer	ntos de "scattering Brillouin	15
1.5. Efecto de la tensión s	superficial sobre las ondas elásticas de su-	
perficie en cristales cu	úbicos	19
1.7. Ondas de interfase en	tre cristales cúbicos	22
CAPITULO 2: EFECTOS DE LA	S PROPIEDADES DE LA SUPERFICIE	
SOBRE LAS ONDAS DE SUPER	FICIE	
2.1. Introducción		23
2.2. Capa delgada sobre u	n sustrato semi-infinito	25
2.3. "Sandwich" A/B/C		31
2.4. Conclusiones		38
FIGURAS		41
BIBLIOGRAFIA		53

-

INTRODUCCION

El estudio de los fenómenos de superfície na experimentado un gran auge en las dos últimas décadas, debido fundamentalmente a su interés tecnólico, al desarrollo de los computadores de alta velocidad y de nuevas y sofisticadas técnicas experimentales que permiten la obtención de datos sobre una gran variedad de procesos ligados a la presencia de la superfície.

Cuando se consideran las propiedades vibracionales de sólidos con superfície, teniendo en cuenta el carácter discreto de la red, se recurre a los métodos de la dinámica de redes. -En este campo, salvo para el caso de los cristales iónicos en el que el "breathing shell model" ha demostrado una gran adecuación a las necesidades del estudio teórico, en la gran mayoría de casos (metales y semiconductores) se continúan utilizando modelos constantes de fuerza que, aunque permiten obtener una valiosa información, tienen limitaciones obvias.

Un estudio complementario del anterior puede realizarse considerando al sólido como un continuo. Si consideramos además que el sólido es elástico estamos en el campo de las ondas elásticas de superfície. Esta aproximación constituye el límite de onda larga de la dinámica de redes, pero su estudio presenta un interés intrínseco. Esto es debido a la posible aplicación de los sistemas acústicos para amplificación de señal, guías de onda,etc.

Los estudios que se han efectuado habitualmente se han centrado fundamentalmente sobre las propiedades dinámicas de superfície, dejando a un lado los aspectos espectroscópico y termodinámico. En el Capítulo 1 estudiamos el caso de los cristales cúbicos que presenta ya una notable dificultad debido a que la anisotropía juega ya completamente su papel. En este caso y gracias al método de emplame de funciones de Green de superfície -(SGFM) hemos desarrollado un potente método de cálculo que permíte obtener no sólo las propiedades dinámicas de superfície, sino tambien las propiedades espectroscópicas y termodinámicas. Dicho método es mucho más flexible que los métodos tradicionalmente -

- empleados hasta ahora, y permíte además el tratamiento unificado de las diferentes propiedades. Se han estudiado asimismo posibles efectos de la tensión superficial, no considerados en los planteamientos tradicionales, sobre las propiedades de la superfície.

En el Capítulo 2 hemos estudiado aquellos casos en los que las propiedades en la región de la superficie son distintas de las que existen en el interior del sólido. Esto tiene importancia en campos muy dispeares tales como sismología, estudios de adsorción, etc. Hemos estudiado así el caso de una capa delgada depositada sobre un sustrato. Claramente este es un posible esquema para modelar la adsorción. Al estudiar la dinámica de este sistema hemos obtenido los resultados más generales posibles hasta la fecha en forma compacta y simplificada.Hemos estudiado asimismo el caso de un "sandwich" A/B/C y el caso particular del defecto plano. Estos casos tienen su importancia para el diseño de guías de onda acústicas.

En resumen, hemos considerado una variedad de casos que presentan interés de cara a la investigación básica y aplicada, generalizando y ampliando los tratamientos existentes. Asimismo los resultados obtenidos en el marco de la teoría de la elasticidad sirven como los límites a los que hay que extrapolar los resultados de la dinámica de redes para gran longitud de onda.

Quiero agradecer al Profesor F.GarcíaMoliner la ayuda y apoyo prestados durante la realización de este trabajo.

6

CAPITULO 1. PROPIEDADES DINAMICAS Y TERMODINAMICAS DE ONDAS ELASTICAS DE SUPERFICIE EN CRISTALES CUBICOS

1.1. Introducción

El estudio de las ondas elásticas en cristales de simetría cúbica plantea dificultades sustanciales debido al hecho de incluir de manera completa los efectos de la anisotropía cristalina. El mero hecho de construir la función de Green elástica (estática) para el volumen de un cristal cúbico resulta ya una tarea considerable (Dederichs y Leibfried 1969). El problema es aún más arduo si se pretenden estudiar las ondas de supe<u>r</u> ficie en cristales anisótropos. Los efectos debidos a la anisotropía son aún objeto de estudio y se pueden encontrar en la l<u>i</u> teratura actual (Lothe y Barnett 1976, Lothe y Al'sits 1977, -Portz y Maradudin 1977).

El estudio de las características dinámicas de las ondas de superfície (amplitudes de los desplazamientos, velocidad de fase, polarización, etc.) ha sido realizado por diversos autores (puede verse una lista bastante completa en Farnell (1969 y en las referencias allí citadas) desde el primer estudio realizado por Stoneley (1955). En el desarrollo de este estudio ha habido diversas conclusiones erróneas, tales como la de las <u>direcciones prohibidas de propagación</u>, según la cual existían diversas combinaciones de superfícies y direcciones en esas superfícies, para las cuales no era posible la propagación de una onda de superfície. Con arreglo a esta concepción el fenómeno de la existencia de ondas de superfície sería más bien la excep ción que la regla.

El extenso estudio, desde un punto de vista numérico, de estos problemas realizado por Lim y Farnell (1968,1969) y por Farnell (1969) no ha en encontrado ninguna combinación de superfície cristalina y de dirección en esa superfície para la cual no pueda propagarse una onda de superfície. Un estudio general de esta cuestión desde un punto de vista analítico no es posible debido a la gran complejidad de las expresiones involucradas.

. 7

Otros autores (Onsager y Moon 1974, Portz y Maradudin 1977) han estudiado el calor específico en el límite de bajas tempersturas para superfícies de cristales cúbicos, utilizando para ello métodos especiales pensados para dar el calor específico de manera directa, pero no la velocidad de la onda de superfície o cualquier otra propiedad dinámica de los modos de superfície. Hasta el momento no parece existir ninguna discusión de los aspectos esprctrales del problema de ondas elásticas de superfície.

Del lado experimental existen determinaciones directas de la velocidad de la onda de superficie para materiales monocri<u>e</u> talinos como Cu (Rollins et. al. 1968) y Si (Pratt y Lim 1969). Existen asimismo algunos datos termodinámicos (Barkman et al.-1965), aunque su cantidad es más limitada. Finalmente, algunos resultados experimentales recientes (Sandercock 1978) han dado nueva información espectroscópica que se relaciona directamente de una menera interesante con algunos aspectos del espectro(densidad de modos) de sistemas con superficie para el caso de cristales cúbicos. Estos experimentos han sido discutidos por diversos autores (Bortolani et al. 1978 a,b,c; Loudon 1978 a,b;Rowell y Stegeman 1978) y serán asimismo discutidos en este trabajo.

Sería por tanto interesante tener un tratamiento unificado del problema de ondas de superfície para cristales cúbicos en el cual todos los diversos aspectos parciales antes mencionados pudieran ser estudiados dentro del mismo esquema teórico y que fuera asimismo capaz de dilucidar nuevos detalles no analizados previamente. Hay que resaltar tambien que los desarrollos actuales y las perspectivas en dispositivos que emplean ondas superficiales han alcanzado un nivel tan elevado en exigencias de rendimiento que el uso de superficies de monocristales esta resultando común, de manera que los efectos de la anisotropía cristalina son importantes (Marshall 1977). Se ve por tanto que un método teórico capaz de dar a la vez una imagen unificada y una manera de estudiar los detalles posee un interés tanto teórico como practico.

Este método que permite tratar de manera unificada las propiedades dinámicas y termodinámicas de superficie es el método de empalme de Funciones de Green Superficiales, abreviadamente SGFM, (García Moliner 1977). La aplicación a cristales cúbicos (Velasco y García Moliner 1980) presenta expresiones de notable complejidad que omitiremos en este trabajo por cuestión de brevedad. Deja remos, por tanto, a un lado las ecuaciones que describen el método SGFM para cristales cúbicos y pasaremos a discutir tan sólo los resultados físicos que se derivan a partir de las mismas.

1.2. Estudio de la Superficie (001)

La novedad de nuestro método reside en la posibilidad de atacar el problema en una forma completamente diferente a las ut<u>i</u> lizadas hasta ahora (Farnell 1969 Barnett et al.1973) en la cual se pueden aclarar aspectos del problema dinámico no estudiados previamente. Además, el mismo método nos permite estudiar los pro blemas termodinámicos y espectroscópicos que se discutirán posteriormente.

Nos concetraremos ahora en el estudio de L espectro del sistema basado en la variación de la Función de Fase

 $\Phi(\kappa,\omega^2) = \frac{1}{2} \arg | \det \underline{g} | + \arg \det | \underline{g}^{S-1} |$ (1.1) que es el análogo del desfasaje en la teoría de "scattering" para estados electrónicos (García Moliner y F. Flores 1979). El cambio total en la densidad de modos debido a la presencia de la superf<u>i</u> cie está dado por

$$\Delta N^{S}(\kappa,\omega^{2}) = \frac{1}{\pi} \frac{d\Phi(\kappa,\omega^{2})}{d\omega^{2}}$$
(1.2)

En esta expresión, así como en expresiones posteriores, ω^2 ha de entenderse como el límite de ω^2 + in cuando $\eta \rightarrow 0$. Esto incluye la aparición de los distintos modos de superficie (p.ej. on das Rayleigh) así como las distorsiones del continuo de estados de volumen que serán discutidos posteriormente. Hemos de resaltar que el estudio del problema de las ondas de superficie es incompleto de manera significativa si sólo se tienen en cuenta losmodos de siérficie, como se puede ver en el papel jugado por otros términos en la termodinámica del sistema con superficie (Velasco y García Moliner 1977, 1979 a.). Con el fin de transformar esto en una densidad total de modos ΔN^S (ω) hemos de integrar en <u>k</u> y cambiar la variable de ω^2 a ω (para lo cual basta con multiplicar por 2ω).

Nos concentraremos ahora en el estudio del espectro del sis tema, basado en las ecs. (1.1) y (1,2). La idea es construir la función de fase y estudiar su dereivada como función de w. Consideremos una dirección arbitraria (no necesariamente de alta simetría). La función de fase cambia en π cuando ω es igual a un autovalor de un modo de superficie. Esto suministra un procedimiento alternativo para calcular velocidades de ondas de superficie (i.e. dado) sin tener que encontrar los ceros de un determi-, ω para nante. Resulta que este método de los autovalores con la misma pre cisión que otros métodos, requiriendo en cambio un esfuerzo de cálculo numérico considereablemente menor. Los resultados de nuevo reproducen aquéllos ya conocidos y no es necesario repetirlos aquí, pero el punto estriba en que ahora tenemos el camino abierto para estudiar la redistribución completa del espectro debida a la presencia de la superficie. Basta con calcular la derivada de la ec. (1.2) y transformarla en ΔN^{S} (κ, ω). En cada autovalor de un modo de superficie tenemos una función ¿de peso + 1. En las restantes partes se obtiene una imagen detallada de los efectos de umbral y de distorsión del continuo volumen.

Demostraremos esto estudiando la superficie (001) del cobre. La Fig.1 contiene dos clases diferentes de información. Las líneas T₁ y T₂ dan las velocidades de los umbrales transversales de volumen para las direcciones en el rango de $\theta = 0^{\circ}a \ \theta = 45^{\circ}$. Todas las velocidades se hallan referidas a $C_{T2} = (C_{44}/\rho)^{1/2}$.Las líneas GRW y PSW dan la velocidad de la onda de superficie propiamente dicha y de la pseudo-onda de superficie. Los valores numéricos describen la redistribución de fuerza espectral en la forma que se discute a continuación.

Tanto las velocidades como la redistribución de la densidad de modos se han obtenido a partir de la función de fase (1.2). Con el fin de estudiar los detalles representados en la Fig.1, es conveniente estudiar primero la situación para algunos valores particulares de 0. Consideremos primero las direcciones de alta simetría θ = 0°y θ = 45°. El cambio total en la densidad de modos debido a la presencia de la superficie se presenta en la Fig.2 pa ra las dos direcciones antes citadas. En este caso el problema puede estudiarse analíticamente (Velasco y García Moliner 1980). La función δ con peso +1 es debida a la aparición en ω_p de la onda de superficie que para ambas direcciones es puramente sagital, de acuerdo con Lim y Farnell (1968). Se ve asímismo la aparición de una función & con peso -1/4 en el umbral longitudinal de volumen ω_{1} . Esto significa que desaparece un cuarto de estado en el borde de la banda de volumen cuando se introduce la superficie. Este efecto, que no había sido discutido previamente para el caso de ondas elásticas, demuestra un principio elemental que puede probarse sobre bases generales para cualquier clase de estados de un sistema con superficie (García Moliner y F. Flores 1979) y es análogo de los efectos de pared dura o de borde de banda que son bien conocidos en el análisis de estados electrónicos de superficie mediante teoría de "scattering" (Tejedor et al.1974, García Moliner y Flores 1979 Inglesfield 1977). Veremos en §1.4 que estos efectos juegan un papel importante en el análisis de datos es pectroscópicos.

La rama correspondiente a la pseudo-onda de superficie (Fig.1) representa modos de superficie que son completamente dif<u>e</u> rentes de las ondas Rayleigh generalizadas. Al estar inmersas en el continuo de estados de volumen las pseudo-ondas de superficie deberían radiar energía al volumen. Por tanto no son auténticos modos estacionarios. No obstante son observables experimentalmente (Engan et al. 1967, Rollins et al. 1968, Rollins 1968, Pratt y Lim 1969).

La pseudo-onda de superficie viene caracterizada analítica mente como una resonancia con el continuo y como tal contribuye

como una Lorentziana de peso + 1 a la densidad de modos, mientras que las ondas Rayleigh generalizadas son verdaderos estados estacionarios con una contribución + 1 δ ($\omega - \omega_R$). La anchura de la Lorentziana mide cuan fuerte es el acoplamiento al continuo de volumen y la vida media del pseudo-estado de superfície.

En la Fig.3 se muestra el cambio total en la densidad de modos para un rango general de direcciones desde 0 = 25° hasta θ = 40°. Estos resultados ponen de manifiesto todas las características del espectro del sistema de ondas superficiales y en par ticular muestra de manera explícita el rasgo clave de los pseudomodos de superficie. Se ve que la Lorentziana correspondiente es siempre aproximadamente aguda, lo cual explica que estos modos, aunque en principio acoplados al volumen, tienen una vida muy lar ga y pueden por tanto ser observados experimentalmente. Además, los tres umbrales de volumen ($\omega_{T1}, \omega_{T2}, \omega_L$) exhiben ahora de mane ra explicita la pérdida de un cuarto estado, que no siempre apare ce de manera explícita en las direcciones de alta simetría debido a las degeneraciones entre modos diferentes y a la acumulación de efectos diferentes a la misma frecuencia. Esto puede verse ahora volviendo a la Fig.1 y estudiando la información numérica allí contenida. Un término del tipo 🍄 16 indica una Lorentzciana muy aguda, casi una función &, de peso total + 1. Esta figura resume toda la información obtenida a partir de los cálculos representados en las Figs. 2 y 3. El umbral longitudinal ω_{T} no se muestra de manera explícita ya que su único rasgo de interés es la contri bución $-\frac{1}{4} \delta(\omega - \omega_{\tau})$, que es la misma para el umbral transversal donde, al movernos hacia las direcciones [100] o [110], encontramos la acumulación de efectos mostrada en la Fig.1 que enmascara el término en $\left(-\frac{1}{4}\right)$.

La imagen que emerge del presente trabajo corrobora compl<u>e</u> tamente los resultados discutidos por Lim y Farnell (1968) y por Farnell (1969). La novedad de nuestro análisis consiste en que da además información significativa adicional, ya que permite obtener una imagen detallada de la redistribución de la densidad de modos debida a la superficie. Se verá en §1.4 que esta imagen está rela

cionada con interesantes problemas espectroscópicos.

La extensión del método SGFM a otras superficies es directa y puede verse en Velasco y GArcía Moliner (1980).

1.3. Termodinámica de la superficie (001)

La aplicación de los resultados que hemos obtenido al estudio de termodinámica del sistema con ondas superficiales es ahora directa. Basta con usar la densidad de modos dada por la ec. (1.2), para evaluar la función vibracional de partición en la manera habitual y realizar la versión bidimensional del modelo Debye análogamente a como se hizo para medios isótropos (Velasco y García Moliner 1977) y hexagonales (Velasco y García Moliner 1979 a).

La fórmula a evaluar es

$$\Delta N^{\mathbf{S}} \quad (\omega^2) = \frac{4}{(2\pi)^2} \int_0^{\pi/4} d\Theta_0^{\int_\infty^{\infty}} d\kappa^2 \frac{1}{\pi} \frac{\partial}{\partial \omega^2} \phi^{(\underline{\kappa}, \omega^2)} . \quad (1.3)$$

que se transforma en ΔN^{s} (ω) simplemente multiplicando por 2 ω .Resulta conveniente dividir el rango de ω^{2} en los cuatro intervalos (0, ω^{2}/C_{L}^{2}), (ω^{2}/C_{L}^{2} , $\omega^{2}/C_{T_{2}}^{2}$), ($\omega^{2}/C_{T_{2}}^{2}$, $\omega^{2}/C_{T_{1}}^{2}$), ($\omega^{2}/C_{T_{1}}^{2}$, ω^{2}).

El resultado es de la forma

$$\Delta N^{5}(\omega) = \frac{2AB}{\pi^{2}} \omega , \qquad (1.4)$$

donde A es el área de la superficie y B una constante con dimensiones $\left[L^{-2} T^2 \right]$, cuyo valor depende de las constantes elásticas y de la densidad de cada cristal.

La cantidad experimental de interés es a menudo el calor especifico a volumen constante para temperaturas bajas, i. e., el cambio total en capacidad calorífica por unidad de área de la superficie. Esto incluye todos los efectos debidos a la superficie, como ya se resaltó anteriormente y dichos efectos son incor

porados en la fórmula completa para ΔN^S (1.1,2) como se discutió en los apartados anteriores. Como es sabido, una densidad de modos tal como (1,4) da un calor específico a temperaturas bajas de la forma

$$\Delta C^{5} = bT^{2}$$
, (1.5)

donde

 $b = \frac{12B}{h^2 \pi^2} \zeta (3) k_B^3 , \qquad (1.6)$

 k_{B} es la constante de Boltmann y es la función ζ de Riemann (ζ (3) = 1.202).

Como ejemplo consideremos el caso del NaCl. En el límite de bajas temperaturas la rama óptica está congelada y basta con estudiar la contribución de los modos acústicos al calor específico. Por otra parte, resulta conveniente estudiar este tipo de material ya que se presta mejor que otros a la medida del calor específico de superficie. Los experimentos de Barkman et al. 1965 dan b = 4.6×10^{-5} erg cm⁻² K⁻³. Nuestros análisis utilizando los valores de las constantes elásticas a 0°K dados por Overton y Swin (1951) da, en las mismas unidades, b = 3.04x10⁻⁵, que concuerda razonablemente con el valor experimental si se tiene en cuenta que la información experimental no es habitualmente muy precisa en este tipo de experimentos, debido principalmente a la dificultad para obtener una buena determinación del área de la su perficie de la muestra. Portz y Maradudin (1977), empleando un mé todo diseñado específicamente para calcular sólo el calor específico a bajas temperaturas, obtuvieron b = 3.034×10^{-5} . Se ve que todas las estimaciones basadas en el límite elástico poseen muy buen acuerdo mutuo, radicando la ventaja de nuestro método en que también da los resultados discutidos en §§ 1.2, 1.4 y 1.5.

Un cálculo de b basado en un modelo de dinámica de redes fue hecho por Chen et al. (1971). Este dio b = 3.80×10^{-5} , que representa una ligera mejora de los resultados obtenidos en el l<u>í</u> mite elástico. No obstante, este análisis presenta una dificultad teórica esencial. El cálculo se hizo para una lámina de espesor finito con 15 capas atómicas y solo se pudo obtener el valor de b para temperaturas entre 20 y 5°K. El problema estriba en que a me dida que disminuye T la contribución dominante al calor específico proviene de fonones con longitud de onda muy larga y pronto las longitudes de onda relevantes son mayores que el espesor de la lámina. De hecho la ley T^2 para $T \rightarrow 0$ ha resultado hasta ahora imposible de obtener de manera explícita a partir de modelos realistas de dinámica de redes, ya que esto requeriría un número de capas atómicas excesivamente grande. Por otra parte el modelo elástico se presta bastante facilmente al estudio de un medio s<u>e</u> mi-infinito.

1.4. Análisis de experimentos de "scattering" Brillouin

Como se ha resaltado anteriormente el propósito del presente análisis es no sólo calcular las velocidades de las ondas de superficie, sino también estudiar en detalle el nuevo espectro del sistema cuando se introducen todos los efectos debidos a la superficie. Actualmente no existe ninguna técnica experimental capaz de dar toda la información detallada presentada en las Figs.2 y 3,pero puede obtenerse alguna evidencia experimental en otras formas. Una es indirecta, basada en datos termodinámicos. Esto refleja una propiedad global del espectro completo (Velasco y García Moliner 1977, 1979 a) y por tanto no dice nada respecto a los detalles.

Los datos de "scatering" Brillouin por otra parte pueden dar información directa sobre algunos de estos detalles. En experimentos de reflexión parte de la radiación dispersada en for ma no elástica está producida por la obsorción de ondas de superficie excitadas térmicamente (Sandercock 1978).

Existen dos mecanismos posibles. Uno está asociado a la componente longitudinal u₁ del desplazamiento de la onda de supe<u>r</u> ficie. Su carácter compresional puede producir efectos elasto-ópticos, que pueden producir entonces "scattering" de luz. El otro

mecanismo está asociado con la componente normal del desplazamien to u₃, i.e., con la propagación de un rizo superficial. Loudon (1978 a,b), extendiendo trabajos teóricos previos de Fabelinskii (1968) y de Lean (1975), ha demostrado que el mecanismo de rizos es predominante para materiales muy opacos como metales, mientras que el mecanismo elasto-óptico representa una contribución importante para materiales menos opacos, como p.ej. GaAs. Diversos artículos teóricos han aparecido recientemente sobre esta materia (Bortolani et al. 1978 a,b,c; Rowell y Stegeman 1978; Velasco y García Moliner 1980) y estos bastan para entender los rasgos esen ciales de los experimentos de Sandercock(1978) y de los desarrollos teóricos de Loudon (1978). Es interesante discutir ahora detalles más finos de las líneas espectrales del "scattering" Brillouin para resaltar su íntima conexión con la teoría del espectro de onda de superficie estudiada en §1.2.

Para ello hemos de notar que, salvo factores irrelevantes, la densidad de modos (para k fijo) tiene la forma

$$N(\omega^{2}) \propto -Im \Sigma^{3} \int dz G_{ii}^{S}(z,z'=z)$$
(1.7)

$$i = 1$$

Los corrimientos en frecuencia medidos por Sandercock (1978) están en el rango de los GHz y en este caso el límite de altas temperaturas se alcanza para la temperatura ambiente. Benett et al. (1972) han probado que en este límite la sección eficaz diferencial para "scattering" Brillouin por ondas de supe<u>r</u> ficie es, muy aproximadamente, proporcional a la densidad local (o "proyectada") de modo, i.e., en el lenguaje de las funciones de Green,

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} \propto -\operatorname{Im} \Sigma^3 g_{ii}^{S} = -\operatorname{Im} \Sigma^3 G_{ii}^{S} (z=0,z'=0) . \quad (1.8)$$

$$i = 1 \qquad i = 1$$

En esta expressión hemos omitido factores irrelevantes y triviales (p.ej. térmicos). La diferencia en el tipo de información que se obtiene a partir de datos termodinámicos y de "scattering" Brillouin resulta evidente al comparar las ecs. (1.7) y (1.8). Como ya se indicó anteriormente, para materiales opacos sólo g_{33}^{s} contribuye de manera signigicativa a la ec. (1.8).

Así la teoría de Loudon (1978) da, para el caso de "scattering" por rizos superficiales

$$\frac{\mathrm{d}^2\sigma}{\mathrm{d}\Omega\mathrm{d}\omega} \propto \langle |\mathbf{u}_3(0)|^2 \rangle_{\underline{\kappa},\omega}$$
 (1.9)

(el promedio térmico). En virtud del teorema de fluctuación-disipación se puede escribir

$$|u_3(0)|^2 = -\frac{\pi}{\pi} [n(\omega)+1] \operatorname{Im} g_{33}^s$$
, (1.10)

que, tomando el límite de alta temperatura, nos lleva a la ec. (1.8).

Las proyecciones superficiales g_{ii}^{s} , i.e., las densidades locales parciales de modos, incluyen todos los efectos debidos a la presencia de la superficie. Por tanto, aunque la información dada por los datos de "scattering" Brillouin se refiere sólo a la densidad local de modos, es una representación clara e inequívoca de la misma.

Concentrémonos ahora en la naturaleza de las ramas debidas a la onda de superficie y a la pseudo-onda de superficie, representadas en la Fig.1. La superficie (001) del Si es en este sentido similar a la del cobre. El punto estriba en que la onda de superficie generalizada es puramente sagital para $\theta = 0^{\circ}$. A medida que θ aumenta, aparece una componente tangencial u₂ a expensas de u₁ y u₃, hasta que para $\theta = 45^{\circ}$ dicho modo se convierte en un modo transversal puro (u₁ = u₃ = 0), degenerado con el --- umbral transversal de volumen. La misma descripción es aplicable a la pseudo-onda de superficie pero yendo de $\theta = 45^{\circ}$ a $\theta = 0^{\circ}$. Ahora bien, la capacidad del rizo para producir "scattering" depende de la magnitud de g_{33}^{S} . Esperamos por tanto que el pico pri<u>n</u> cipal en la sección es eficaz experimental medida será debido al modo GRW (Fig.1) para θ próximo a [100] y al modo PSW para θ pro ximo a [110]. Se puede comprobar (Velasco y Garcá Moliner 1980 a) que el cambio en la dominancia de una rama sobre la otra se producirá en la vecindad de $\theta = 30^{\circ}$. Es por lo tanto interesante estudiar este rango con mayor detalle.

La Fig.4 da la evaluación completa de g_{33}^s como función de la frecuencia para cuatro valores de θ cubriendo este rango de direcciones para la superficie (001) del Si. De acuerdo con las ecs. (1.9) y (1.10), esto es proporcional a la sección eficaz d<u>i</u> ferencial de "scattering". Resulta claro que hasta $\theta = 27^{\circ}y28^{\circ}$ (Fig.4a,b), el pico principal en los resultados experimentales es debido aún al modo de superficie, para $\theta = 30^{\circ}$ (Fig.4c) la trans<u>i</u> ción está teniendo lugar (ambas ramas contribuyen con cantidades similares) pero la pseudo-onda de superficie ha comenzado a dom<u>i</u> nar y para $\theta = 35^{\circ}su$ preponderancia es absoluta.

La superficie (001) del Si ha sido estudiada experimen talmente por Sandercock (1978), quien midió la posición del pico principal y a partir de estas medidas determinó las velocidades de la onda de superficie en función de θ . La Fig.5 muestra estos resultados junto con los obternidos mediante nuestro método de cálculo, así como con valores experimentales independientes obt<u>e</u> nidos a partir de datos ultrasónicos (Pratt y Lim 1969). Los valores teóricos de las velocidades se obtuvieron mediante los cá<u>l</u> culos mostrados en la Fig.4, realizados para los valores de θ que se consideran. El acuerdo con la curva experimental de Sandercock (1978) es muy bueno en lo que responde a la dependencia angular, pero las velocidades absolutas son sistemáticamente menores que las teóricas. Estas fueron recalculadas directamente a partir de la función de fase, como aquellos calculados por Farnell (1969) usando un enfoque diferente. Además, los resulta-

dos experimentales independientes de Pratt y Lim (1969) presentan muy buen acuerdo con las predicciones teóricas, siendo el único rango ambiguo el próximo $\theta \cong 30^{\circ}$ (indicado por una barra vertical en la Fig.5). La razón teórica de esta ambiguedad ha sido discut<u>i</u> da anteriormente. Hemos de resaltar finalmente que un corrimiento vertical uniforme de un 2.6 % de los valores de Sandercock (flechas en la Fig.5) los sitúa de manera que se comparan muy bien con los otros resultados.

Posteriormente (Loudon y Sandercock 1980) este efecto ha si do explicado como debido a una errónea interpretación de los resultados experimentales debida al montaje del dispositiva experimental. Nuevas medidas efectuadas en condiciones adecuadas coinciden completamente con los resultados teóricos.

1.5. <u>Efecto de la tensión superficial sobre las ondas elásticas</u> de superficie en cristales cúbicos

Hasta el momento hemos considerado que las superficies que estudiábamos eran superficies libres.

Todo ello está de acuerdo con la teória estandard de la elasticidad y ha sido estudiado de diversas formas. Ahora bien, es sabido que el hecho de crear una superficie en un sólido introduce nuevos efectos, que no se ajustan a la forma de las condiciones de contorno para una superficie libre. Uno de tales efectos es la existencia de una tensión mecánica (stress) (Vermaak et al 1969). Esto resulta particularmente interesante en el caso de me dios anisótropos, pues la unión de nisotropía y tensión mecánica puede dar lugar a nuevos fenómenos no considerados hasta ahora.

La evidencia experimental sobre esta materia no es aún del todo lo abundante que sería de desear, pero permite especular acerca de los efectos de esta propiedad superficial.

Hasta el presente se han analizado tan sólo medios isótropos, y es por ello interesante considerar su posible efecto sobre medios anisótropos. Merced a la fórmula de Laplace se obtiene:

$$\Delta \tau_{33} = \tau_{33}^{(2)} - \tau_{33}^{(1)} = -\tau_{3} \frac{\vartheta^2 u_3}{\vartheta x_1^2} + \frac{\vartheta^2 u_3}{\vartheta x_2^2} = \tau \kappa^2 u_3, \quad (1.11)$$

siendo τ_{33} la componente normal del tensor de tensiones y $m{ au}$ la tensión.

Los detalles para la inclusión formal de la tensión s<u>u</u> perficial en el formalismo SGFM pueden verse en García Moliner (1977).

Para ilustrar los efectos de la tensión mecánica sobre las propiedades dinámicas de superficie vamos a considerar el c<u>a</u> so del W. Este material es particularmente interesante pues presenta una tensión superficial (surface tensión) muv alta. La ev<u>i</u> dencia experimental es sobre γ y no sobre τ , pero nada hace sospechar que el orden de ambas magnitudes sea radicalmente dif<u>e</u> rente. Además algunos cálculos modelo en la línea de los realiza dos por Price y Hirth (1976) corroboran la anterior hipótesis. Tomaremos τ = 4500 dinas/cm, que es un valor común para el W a temperatura ambiente. Los cálculos a realizar son ahora exclusivamente númericos y por ello pasaremos a discutir los resultados.

Las ondas de superficie son dispersivas de manera análoga a lo predicho para medios isótropos (Murdoch 1976, García Moliner 1977, Velasco y García Moliner 1979 b).

Asimismo hemos encontrado que la relación de dispersión para la onda de superficie presenta un corte. Estos dos efectos pueden resumirse en las expresiones siguientes:

$$\omega = R (\kappa) \kappa$$
$$R < R (\kappa) < T$$

donde R es la velocidad de la onda de Rayleigh en la dirección correspondiente y T es la velocidad de la onda transversal más lenta en dicha dirección.

Hemos obtenido los siguientes valores para los < de corte:

$$\kappa_{\tilde{c}c} = 4.36 \times 10^8$$
 cm⁻¹, dirección [100],
 $\kappa_{cc} = 3.12 \times 10^8$ cm⁻¹, dirección [110],

Entre estos dos valores extremos se producen los cortes en las distintas direcciones de propagación en la superficie (001).

La interpretación física de estos resultados es bastante clara. Al añadir la condición sobre las tensiones normales estamos añadiendo una fuerza restauradora extra que tiende a apla nar los rizos superficiales, endureciendo por tanto las frecuencias de superficie.

Resulta claro que los efectos introducidos al considerar la tensión superficial podrían tener su mayor influencia so bre las propiedades termodinámicas, ya que si κ_{cc} es más pequeño que el κ de corte asociado a un modelo Debye o a la primera zona de Brillouin, puede haber efectos apreciables. Los resultados que hemos obtenido para el W tienen valores muy próximos a los κ que corresponden al valor máximo en un modelo Debye para este material o a la primera zona de Brillouin. Parece por tanto que este caso está en el límite marginal y el efecto sobre las propiedades termodinámicas sería poco importante.

El hecho de que ahora las ondas de superficie sean dispersivas provoca variaciones en la velocidad de dichas ondas. Para longitudes de onda tales que $\kappa \sim 10^5 \text{ cm}^{-1}$ (accesibles por espectroscopía Brillouin) nuestros cálculos indican que

$$\frac{\Delta R}{R} < 0.1\%$$

por lo cual estos efectos no pueden ser detectados con la tecnolo gía actualmente existente. Las técnicas de ultrasonido son aplica bles para κ más pequeños, con lo cual Δ R/R es aún más pequeño y escapa a la detección experimental. Hemos estudiado asímismo los casos de los materiales Au y Ag utilizando los datos de Vermaak y Kuhlmann-Wilsdorf (1969) y Wasserman y Vermaak (1970), respectiva mente, para τ pero las conclusiones alcanzadas son esencialmente las mismas que las ya presentadas para el W, por lo que no discu-

tiremos estos casos.

Hemos visto por tanto que los efectos de la tensión mecánica pueden producir en principio consecuencias no triviales. No obstante, y dado el actual estado del conocimiento y la tecno logía en este campo, tales consecuencias escapan a la detección experimental.

1.7. Ondas de interfase entre cristales cúbicos

Mientras las interfases entre medios elásticos isótropos (Stoneley 1924, García Moliner 1977) y entre cristales hexagonales (Djafari-Rouhani y Dobrzynski 1976, Velasco y García Moliner 1979a) han sido estudiadas con suficiente detalle, se con<u>o</u> ce comparativamente poco respecto a los efectos de anisotropía cristalina cuando la interfase está formada por cristales cúbicos. Un cálculo numérico fue realizado por Lim y Musgrave (1970) para una interfase entre Cu y otros cristales hipotéticos, que se suponía poseían las mismas propiedades elásticas que el Cu, exceptuando el valor de C_{AA} .

A continuación citamos los resultados que hemos obtenido con nuestro método al estudiar interfases reales.

Para las interfases epitaxiales (001) Si/Ni y W/Cu, no es posible la propagación de ondas de interfase. La interfase (001) W/Al (epitaxial o no) es extremadamente apta para la propagación de una onda Stoneley.

Todos los datos elásticos para los cálculos han sido tomados de Kittel (1971). Finalmente haremos algunos comentarios, sobre las ondas de interfase que hemos obtenido.

En primer lugar las ondas de interfase se atenúan en ambos sentidos alejándose de la interfase. En el caso de una dirección de propagación general la onda de interfase no es puramente transversal ni puramente longitudinal. Para direcciones de alta simetría tales como las direcciones [100] y [110] la onda de interfase está contenida en el plano sagital, formado por la normal a la interfase y la dirección de propagación.

22

CAPITULO 2. EFECTOS DE LAS PROPIEDADES DE LA SUPERFICIE SOBRE LAS ONDAS DE SUPERFICIE

2.1. Introducción

En el Capítulo 1 hemos estudiado las propiedades dinámicas y termodinámicas de superficie en los cristales cúbicos. Este estudio resulta interesante porque permite conocer los efectos de la anisotropía sobre sobre las propiedades físicas arriba mencionadas. No obstante, aparte de los fenómenos asocia dos con la superficie libre de un sólido, existen otras propiedades interesantes que están relacionadas con la interfase entre dos medios (sólidos o fluidos) distintos.

Existen diferencias importantes entre ambos casos, pues en la superficie de un sólido existe siempre una onda de superficie que se propaga (Farnell 1970, Velasco y García-Moliner, 1980), mientras que existen muy pocas interfases entre sólidos en las que pueda propagarse una onda localizada (Scholte, 1947). Esto puede comprenderse de manera intuitiva ya que los átomos en la superficie tienen menos vecinos en la dirección perpendicular a la superficie, lo que hace que las fuerzas sobre ellos sean menores y sus frecuencias de vibración tiendan a ablandarse, y existan modos de superficie: por debajo de los umbrales de volumen. En cambio en la interfase existen interacciones entre los átomos de ambos materiales que tienden a endurecer las frecuencias de vibración de los átomos de la interfase y esto explica la mayor dificultad para que pueda propagarse un modo localizado en la interfase, cuya frecuencia habría de estar por debajo del umbral de volumen.

Pero asímismo existen otros tipos de problemas de interés, en los que se ven envueltas varias interfases. Este es el caso de los medios estratificados cuyo estudio presenta un not<u>a</u> ble interés en sismología (Ewing et al. 1957). En el caso más general de varias interfases no es posible obtener relaciones de dispersión analíticas para las ondas localizadas, aunque se haga la aproximación de considerar los medios isótropos.

Aparte del interés de la sismología en estos estudios, existen numerosos casos de gran importancia para el conocimiento fundamental y aplicado. Así, por ejemplo, un "sandwich" de tres medios elásticos distintos A/B/C/ podría constituir una guía de onda. El caso particular A/B/A, siendo el espesor h del medio B pequeño, permite considerar el defecto plano y estudiar la existencia de modos localizados en este caso. Si consideramos el caso de un estrato de espesor finito, sobre un sustrato semi-infinito, se obtienen ya notables diferencias frente al caso de la superficie libre, tales como la posible existencia de un modo Love (modo transversal paralelo a la superficie) y el hecho de que la onda de superficie se hace dispersiva. Si el espesor del estrato es pequeño se pueden realizar ciertas aproximaciones que permiten obtener una expresión más sencilla para la relación de dispersión. Este caso ha permitido idear una aproximación denominada de membrana equivalente (Velasco y García-Moliner 1979b), que permite incorporar los cambios introducidos por la presencia del estrato, como modificaciones de las condiciones de contorno, para la superficie libre. Resulta claro que este punto de vista suministra un punto de partida excelente para considerar efectos tales como los cambios en las constantes de interacción en las proximidades de la superficie, o las modificaciones debidas a la presencia de un adsorbato. Estos efectos no pueden ser evalua dos actualmente a partir de modelos microscópicos y su inclusión en estudio de dinámica de redes vía modelos de constantes de fuer zas se ha limitado a consideraciones puramente numéricas, y sin considerar ni siquiera su influencia sobre el límite de onda lar ga. Esto permitirá al menos un estudio cualitativo de los efectos de estos cambios sobre las propiedades dinámicas de superfi cie, lo cual contribuiría notablemente a entender estos efectos.

24

2.2 Capa delgada sobre un sustrato semi-infinito

Consideraremos ahora una capa delgada sobre un sustrato semi-infinito. Supondremos que ambos medios son isótropos para simplificar los cálculos, aunque esta hipótesis no cambia la naturaleza general de los resultado obtenidos.

En el caso más general de un estrato de espesor h arbitrario no es posible obtener una relación de dispersión para los modos localizados en forma analítica (Ewing et al. 1957, Velasco y García Moliner 1979b); es por tanto necesario estudiar numéricamente el determinante secular.

No obstante, este problema es más interesante para la sismología que para intentar comprender los efectos debidos a que las propiedades de la superficie difieran de las de volumen. Resulta claro que para intentar estudiar estos efectos hemos de centrarnos en el caso de un estrato con espesor h pequeño.

En este caso se pueden hacer ciertas aproximaciones que permiten simplificar grandemente el problema. Tiersten (1969) estudió este caso utilizando numerosas aproximaciones empleadas en la teoría de láminas delgadas, llegando al final a escribir los nuevos efectos como modificaciones en las condiciones de contorno. Este tratamiento, aunque elegante, resulta complicado en muchos puntos. Las aproximaciones constituidas por los modelos de membrana (Murdoch 1976) y de membrana equivalente (Velasco y García Moliner 1979b) permiten introducir directamente estos efectos como modificaciones en las condiciones de contorno. Las expresiones así obtenidas coinciden formalmente con las deducidas por Tiersten (1969), aunque es preciso hacer una equivalencia entre los coeficientes de la membrana y los coeficientes deducidos por Tiersten, lo cual da origen a unas relaciones que a primera vista son algo sorprendentes. Parece por tanto necesario estudiar de forma más completa este caso para aclarar las analogías y discrepancias entre las diferentes aproximaciones antes de pasar a discutir los resultados.

Consideremos un medio isótropo A semi-infinito que se extiende nasta $x_3 = 0$, cuya densidad es ρ y sus módulos de Lamé λ y μ , y que sobre él existe otro medio isótropo B con una superficie libre en $x_3 = -h$ (por tanto de espesor h) cuya densidad y módulos de Lamé son ρ' , λ' y μ' respectivamente. Los modos localizados en este caso están sujetos a las siguientes condiciones de contorno

$$\begin{bmatrix} u_i \end{bmatrix}_{x_3=0} = \begin{bmatrix} u'_i \end{bmatrix}_{x_3=0}$$
 (i = 1,2,3) (2.1a)

$$\begin{bmatrix} \tau_{13} \end{bmatrix}_{x_3=0} = \begin{bmatrix} \tau_{13} \end{bmatrix}_{x_3=0}$$
 (2.1b)
$$\begin{bmatrix} \tau_{13} \end{bmatrix}_{x_3=-h} = 0$$
 (2.1c)

Estas condiciones indican que los desplazamientos han de ser continuos en la interfase $x_3 = 0$, así como las tensiones normales a la misma, y que la superficie exterior $x_3 = -h$ es una superficie libre.

Si el espesor h es pequeño podemos desarrollar (2.1c) en serie de Taylor hasta primer orden en h y se obtiene:

$$[u_{i}]_{x_{3}=0} = [u_{i}]_{x_{3}=0}$$
 (2.2a)

$$\begin{bmatrix} \tau_{13} \end{bmatrix}_{x_3=0} = h \begin{bmatrix} \vartheta & \tau_{13} \\ \vartheta & x_3 \end{bmatrix} x_3=0$$
(2.2b)

Para simplificar el cálculo en los razonamientos que siguen supon dremos que la dirección de propagación es la x_1 . Esto no afecta a los resultados que se obtienen, pero permite reducir el número de términos que aparecen en las expresiones.

Si tenemos en cuenta las ecuaciones del movimiento

$$-\mu \vec{\sigma}^2 u_i - (p_i + \lambda) \vec{v}_i (di \vee \underline{u}) + \rho \vec{u}_i = f_i, \qquad (2.3)$$

(siendo f la fuerza exterior) y las condiciones de contorno en $x_3 = 0$

$$\mu\left(\frac{\partial u_{1}}{\partial X_{3}}+\frac{\partial u_{3}}{\partial X_{1}}\right)=\mu'\left(\frac{\partial u_{1}}{\partial X_{3}}+\frac{\partial u_{3}'}{\partial X_{1}}\right) \qquad (2.4a)$$

$$\mu\left(\frac{\partial u_2}{\partial X_3}\right) = \mu'\left(\frac{\partial u_2}{\partial X_3}\right) \tag{2.4b}$$

$$\lambda \left(\frac{\partial u_1}{\partial X_1} \right) + \left(\lambda + 2 \rho_1 \right) \left(\frac{\partial u_1}{\partial X_2} \right) = \left(\rho \left(\frac{\partial u_1}{\partial X_2} \right) + \lambda' \left(\frac{\partial u_2}{\partial X_2} \right)^{(2.4c)}$$

se puede, tras un cálculo laborioso pero directo, llegar a obtener las siguientes condiciones de contorno:

$$\mu \left[\frac{\partial u_1}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_1} \right]_{x_3=0} = -h \left[e' \omega^2 \left[u_1 \right]_{x_3=0} - h \left\{ \frac{4\mu'(\lambda'+\mu')}{\lambda'+2\mu'} \right\} \times \left[\frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1} \right]_{x_3=0} - \frac{h \lambda'}{\lambda'+2\mu'} \left[\lambda \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1^2} + (\lambda + 2\mu) \frac{\partial^2 u_3}{\partial x_1 \partial x_3} \right]_{x_3=0(2.5a)}$$

$$\mu \left[\frac{\vartheta u_2}{\vartheta x_3}\right]_{X_{3=0}} = -h \rho' \omega^2 \left[u_2\right]_{X_{3=0}} - h \mu' \left[\frac{\vartheta^2 u_2}{\vartheta x_4^2}\right]_{X_{3=0}}$$
(2.5b)
$$\left[\lambda \frac{\vartheta u_4}{\vartheta x_4} + (\lambda + 2\mu) \frac{\vartheta u_3}{\vartheta x_3}\right] = -h \rho' \omega^2 \left[u_3\right]_{X_{3=0}} - h \mu \left[\frac{\vartheta^2 u_3}{\vartheta x_4^2} + \frac{\vartheta^2 u_4}{\vartheta x_4}\right]_{X_{3=0}}$$
(2.5c)

Analicemos ahora las aproximaciones antes citadas. Tiersten(1969) considera sólo el modo sagital por lo que sus condiciones de contorno son las siguientes:

$$\mu \left[\frac{\partial u_{4}}{\partial x_{3}} + \frac{\partial u_{3}}{\partial x_{4}} \right]_{x_{3}=0}^{=-h \rho' \omega^{2} \left[u_{4} \right]_{x_{3}=0}^{-h \rho' \left[\frac{\partial \mu' \left(\lambda' + \mu' \right)}{\lambda' + 2\mu'} \right] \left[\frac{\partial^{2} u_{4}}{\partial x_{4}^{2}} \right]_{x_{3}=0}^{-(2.6a)}$$

$$\left[\lambda \frac{\partial u_{4}}{\partial x_{4}} + \left(\lambda + 2\mu \right) \frac{\partial u_{3}}{\partial x_{3}} \right]_{x_{3}=0}^{=-h \rho' \omega^{2} \left[u_{3} \right]_{x_{3}=0}^{-(2.6b)}$$

$$(2.6b)$$

En la aproximación del modelo de membrana equivalente (Velasco y García-Moliner 1979b) se considera el siguiente tensor de tensiones superficial (\prec , β , $\delta = 4$, 2):

$$\mathcal{T}_{\alpha\delta}^{\delta}\delta(x_{3}) = \left[(\Gamma_{5} - 2\mu_{5}) \delta_{\alpha\delta} \sum_{r} \frac{\partial u_{r}}{\partial x_{r}} + \mu_{5} \left(\frac{\partial u_{\alpha}}{\partial x_{0}} + \frac{\partial u_{\beta}}{\partial x_{\alpha}} \right) \right] \delta(x_{3}), \quad (2.7)$$
siendo $\Gamma_{5} = \lambda_{5} + 2\mu_{5}$.

Si se considera que hay un exceso superficial de masa y teniendo en cuenta el anterior tensor de tensiones superficial, se obtienen las siguientes condiciones de contorno:

$$\mu \left[\frac{\vartheta u_4}{\vartheta X_3} + \frac{\vartheta u_3}{\vartheta X_1} \right]_{X_3=0} = -\rho_s \, \omega^2 \left[u_4 \right]_{X_3=0} - \Gamma_s \left[\frac{\vartheta^2 u_4}{\vartheta X_1^2} \right]_{X_3=0} \quad (2.8a)$$

$$\mu \left[\frac{\vartheta u_4}{\vartheta X_3} \right]_{X_3=0} = -\rho_s \, \omega^2 \left[u_4 \right]_{X_3=0} - \mu_s \left[\frac{\vartheta^2 u_4}{\vartheta X_1^2} \right]_{X_3=0} \quad (2.8b)$$

$$\left[\lambda \frac{\mathcal{Q}\mathcal{U}_{1}}{\mathcal{Q}\mathcal{X}_{1}} + (\lambda + 2\mu) \frac{\mathcal{Q}\mathcal{U}_{3}}{\mathcal{Q}\mathcal{X}_{3}}\right]_{\mathcal{X}_{3}=0} = -\beta \omega^{2} \left[\mathcal{U}_{3}\right]_{\mathcal{X}_{3}=0}$$
(2.8c)

El modelo de membrana equivalente y la aproximación de Tiersten coinciden idénticamente si se efectúa la siguiente identificación

$$f_s = h \rho'$$
 (2.9a)

$$\mu s = h \mu' \tag{2.9b}$$

$$\lambda s = h \frac{2\lambda'\mu'}{\lambda' + 2\mu'}, \qquad (2.9c)$$

con lo cual se obtiene

$$\Gamma_s = h - \frac{4\mu'(\lambda'+\mu')}{\lambda'+2\mu'}$$

Esta identificación a primera vista tan extraña no lo es tanto si se tiene en cuenta que la velocidad de las ondas longitudinales para una lámina delgada es

$$c^{2} = \frac{4\mu'(\lambda'+\mu')}{(\lambda'+2\mu')\rho'}$$
 (2.10)

Ahora es más fácil entender el sentido físico de las magnitudes involucradas en esta aproximación.

No obstante es fácil comprobar que las ecs. (2.5) incluyen más términos que los contenidos en las expresiones (2.6,8) Analicemos brevemente su significado. El modelo de membrana equivelente puede obtenerse a partir de las ecs. (2.5) mediante el siguiente proceso límite:

$$\lim_{h \to 0} p'h = p's \qquad (2.11a)$$

$$\lim_{h \to 0} \mu' h = \mu s \tag{2.11b}$$

$$\lim_{h \to 0} \frac{2\lambda'\mu'}{\lambda' + 2\mu'} h = \lambda s \qquad (2.11c)$$

$$\lim_{n \to \infty} ph = 0 \qquad (2.11d)$$

$$\lim_{k \to 0} \mu h = 0 \qquad (2.11e)$$

$$\lim_{h \to 0} \lambda h = 0 \qquad (2.11f)$$

Este paso al límite se puede justificar de manera bastante intuitiva gracias al siguiente razonamiento: La región en la que había material B va siendo comprimida paulatinamente hacia la superficie , y sustituida por material volúmico de tipo A. Resulta claro que en este proceso las propiedades elásticas del me dio B adquieren valores distintos a los de volumen y al final las únicas magnitudes que tienen sentido físico con las expresa-

das por las ecs. (2.11).

Esto nos permite distinguir cuál es la diferencia entre la aproximación reflejada en las ecs. (2.5) y el modelo de membrana equivalente. Realmente las ecs. (2.5) permiten estudiar el caso de un estrato sobre un medio semi-infinito cuando se verifica la condición h $\kappa \ll 1$, siendo κ el vector de onda del modo de superficie. Se puede ver asimismo analizando con detalle las ecs. (2.5) que los términos no incluidos en las ecs. (2.8) dan origen a términos de orden $(h\kappa)^2$, por lo que su influencia es muy pequeña. Resulta claro entonces que el modelo de membrana equivalente proporciona una excelente aproximación para estudiar los efectos de láminas delgadas sobre sustratos semi-infinitos, así como constituye un punto de partida ideal para modelar de manera cualitativa sistemas en los que las propiedades de superficie difieren de las de volumen.

La ventaja de este modelo frente a las ecuaciones más generales dadas en (2.5) es que permite obtener las modificaciones en las condiciones de contorno de una manera más sencilla, lo cual simplifica asimismo la obtención de la relación de dispersión. Los resultados que se obtienen son los siguientes:

(i) Es posible la asistencia de un modo Love, cuyo desplazamiento está dado por

 $\underline{\mu} = (0, A e^{-\frac{q_{+}}{2}}, 0) e^{i(\kappa x - \omega t)}$ con $q_{+} = (\kappa^{2} - \omega^{2}/t^{2})^{\frac{q_{+}}{2}}$, y que verifica la siguiente relación de dispersión

$$\mu q_{\pm} \equiv \mu \left(K^{2} - \frac{\omega^{2}}{t^{2}} \right)^{\frac{4}{2}} = \left(\mu_{s} \kappa^{2} - \beta \omega^{2} \right)$$
(2.13)

que, pára pequeña se comporta en la forma

$$\omega^{2} = t^{2} \kappa^{2} \left(l - A^{2} \kappa^{2} \right), \qquad (2.14)$$

$$\operatorname{con} A = \left(\frac{\mu_s}{\mu} - \frac{l_s}{\ell}\right) \,. \tag{2.15}$$

(ii) Se obtiene asímismo un modo de superficie polar<u>i</u> zado sagitalmente cuya relación de dispersión está dada por

$$4 \kappa^{2} q_{4} q_{2} - (2\kappa^{2} - \frac{\omega^{2}}{2^{2}})^{2} + \frac{\Gamma_{5}}{\rho} \kappa^{2} \frac{\omega^{2}}{t^{4}} q_{4} + (\frac{\rho}{\ell})^{2} \frac{\omega^{4}}{t^{4}} (\kappa^{2} - q_{4} q_{4}) - \frac{\rho}{\rho} \frac{\omega^{4}}{t^{4}} (q_{2} + q_{4}) = 0 \cdot (2.16)$$

Este modo es dispersivo con las siguientes particularidades: para $\kappa \rightarrow 0$ la velocidad de propagación es la de la onda Rayleigh para la superficie libre. Asímismo esta onda no puede propagarse con un κ arbitrariamente grande, es decir, existe un corte superior en la relación de dispersión.

Hemos obtenido por tanto unas ecuaciones que permiten tratar de manera aproximada pero con notable precisión el caso de un medio semi-infinito cargado por un estrato y clarificado el significado físico, así como las ventajas y limitaciones de las aproximaciones hasta ahora empleadas. Nuestras ecs. (2.5) son las más generales que existen para tratar de manera simplificada el problema de que las propiedades de la superficie difieran de las de volumen, y han permitido aclarar la razón del éxito del modelo de membrana equivalente.

2.3. "Sandwich" A/B/C

Las diferencias que hemos visto entre las distintas aproximaciones empleadas anteriormente pueden resultar más importantes en el caso del "sandwich" A/B/C o del caso particular del defecto plano, que como ya hemos dicho anteriormente pueden servir para el diseño de guías de onda acústicas.

Esto sería interesante, pues el estudio del defecto

plano realizado por Kosevich y Kokhlov (1968) presenta resultados muy diferentes de los obtenidos con el modelo de membrana equivalente (Velasco y García-Moliner 1979b). El trabajo de Kosevich y Kokhlov resulta muy difícil de analizar y además varias de sus integrales han de ser renormalizadas para evitar divergencias. Todo esto hace conveniente el estudiar de nuevo este problema para intentar aclarar cuáles son las aproximaciones consideradas en cada caso, antes de pasar a estudiar casos concretos.

El punto de partida es análogo al considerado anterio<u>r</u> mente para el caso del estrato. Consideraremos inicialmente el caso del "sandwich" A/B/C y posteriormente estudiaremos el caso particular del defecto plano.

Suponemos ahora que tenemos un "sandwich" A/B/C con el medio A (densidad ρ y módulos de Lamé λ y μ) extendiéndose desde $x_3 = \infty$ hasta $x_3 = 0$, el medio B (ρ', λ', μ') extendiéndose desde $x_3 = 0$ hasta $x_3 = -h$, y el medio C (ρ'', λ'', μ'') se extiende desde $x_3 = -h$ hasta $x_3 = -\infty$. Los modos localizados de este sistema obedecen a las siguientes condiciones de contorno (i=1,2,3)

$$[u_i]_{X_3=0} = [u'_i]_{X_3=0}$$
(2.14a)

 $[\tau_{i3}]_{X_{7-0}} = [\tau'_{i3}]_{X_{3=0}}$ ^(2.14b)

$$\begin{bmatrix} u'_i \end{bmatrix}_{X_3=-h} = \begin{bmatrix} u''_i \end{bmatrix}_{X_3=-h}$$
^(2.14c)

$$\left[\mathcal{T}_{i3}' \right]_{X_3=-h} = \left[\mathcal{T}_{i3}'' \right]_{X_3=-h}$$

Este sistema de ecuaciones resulta imposible de resolver analí-

ticamente si el espesor h es arbitrario. Si el espesor h es pequeño se pueden hacer diversas aproximaciones que reducen la com plejidad del anterior sistema de ecuaciones. Si tenemos en cuenta que el espesor de la lámina es pequeño, las ecuaciones (2.14) pueden desarrollarse en la siguiente forma:

$$[u_i]_{x_3=0} = [u'_i]_{x_3=0}$$
(2.15a)

$$[\tau_{i3}]_{x_{3}=0} = [\tau_{i3}']_{x_{3}=0} \qquad (2.15b)$$

$$[u'_i]_{x_3=0} - h \left[\frac{9u'_i}{9x_3} \right]_{x_3=0} = [u''_i]_{x_3=-h}$$
 (2.15c)

$$[\mathcal{T}'_{i3}]_{X_{3}=0} = h \left[\frac{\partial \mathcal{T}'_{i3}}{\partial X_{3}} \right]_{X_{3}=0} = \left[\mathcal{T}''_{i3} \right]_{X_{3}=-h}$$
(2.15d)

Con lo cual se llega a las siguientes ecuaciones:

$$[u_i]_{x_{3=0}} - [u_i'']_{x_{3=-h}} = h \left[\frac{\partial u_i'}{\partial x_3}\right]_{x_{3=0}}$$
(2.16a)

$$[T_{i3}]_{X_{3=0}} - [T_{i3}'']_{X_{3=-h}} = h \left[\frac{\partial T_{i3}'}{\partial X_{3}}\right]_{X_{3=0}}$$
(2.16b)

Como se ve, hemos obtenido una notable simplificación respecto a las ecuaciones de partida. En términos de funciones de Green estas ecuaciones se expresan de la siguiente forma:

$$G_{1j}(+o,X'_3) - G_{1j}''(-h-o,X'_3) = h \left[\frac{\partial}{\partial X_3} G_{1j}'(X_3,X'_3) \right]_{X_3=-0}$$
 (2.17a)

$$G_{2j}(+0, X'_{3}) - G_{2j}'(-h-0, X'_{3}) = h \left[\frac{\partial}{\partial X_{3}} G_{2j}'(X_{3}, X'_{3}) \right]_{X_{3}=-0} , \qquad (2.17b)$$

$$G_{3j}(+o, x'_3) - G''_{3j}(-h-o, x'_3) = h \left[\frac{0}{0x_3} G'_{3j}(x_3, x'_3) \right]_{x_3=-0}$$
, (2.17c)

$$\mu \left[\frac{\partial}{\partial X_{3}} \left(\xi_{1j} \left(X_{3}, X_{3}^{\prime} \right) + i \kappa \left(\xi_{3j} \left(X_{3}, X_{3}^{\prime} \right) \right) \right]_{X_{3} = +0} - \mu^{\prime\prime} \left[\frac{\partial}{\partial X_{3}} \left(\xi_{1j}^{\prime} \left(X_{3}, X_{3}^{\prime} \right) + i \kappa \left(\xi_{3j}^{\prime} \left(X_{3}, X_{3}^{\prime} \right) \right) \right]_{X_{3} = -h - 0} = \\
= h \mu^{\prime} \left[\frac{\partial}{\partial X_{3}^{2}} \left(\xi_{1j}^{\prime} \left(X_{3}, X_{3}^{\prime} \right) + i \kappa \left(\frac{\partial}{\partial X_{3}} \right) \left(\xi_{3j}^{\prime} \left(X_{3}, X_{3}^{\prime} \right) \right) \right]_{X_{3} = -0} \right) \quad (2.17d) \\
\mu \left[\frac{\partial}{\partial X_{3}} \left(\xi_{2j} \left(X_{3}, X_{3}^{\prime} \right) \right) \right]_{X_{3} = +0} - \mu^{\prime\prime} \left[\frac{\partial}{\partial X_{3}} \left(\xi_{2j}^{\prime\prime} \left(X_{3}, X_{3}^{\prime} \right) \right]_{X_{3} = -h - 0} \right] \\
= h \mu^{\prime} \left[\frac{\partial^{2}}{\partial X_{3}^{2}} \left(\xi_{2j}^{\prime} \left(X_{3}, X_{3}^{\prime} \right) \right]_{X_{3} = +0} - \mu^{\prime\prime} \left[\frac{\partial}{\partial X_{3}} \left(\xi_{2j}^{\prime\prime} \left(X_{3}, X_{3}^{\prime} \right) \right]_{X_{3} = -h - 0} \right] \\
= h \mu^{\prime} \left[\frac{\partial^{2}}{\partial X_{3}^{2}} \left(\xi_{2j}^{\prime} \left(X_{3}, X_{3}^{\prime} \right) \right]_{X_{3} = -0} \right) \quad (2.17e) \\
\left[i \kappa \lambda \left(\xi_{2j} \left(X_{3}, X_{3}^{\prime} \right) + \left(\lambda^{\prime\prime} + 2\mu^{\prime\prime} \right) \frac{\partial}{\partial X_{3}} \left(\xi_{3j}^{\prime} \left(X_{3}, X_{3}^{\prime} \right) \right) \right]_{X_{3} = +0} - \frac{1}{16} \left[\xi_{2j}^{\prime\prime} \left(\xi_{2j}^{\prime$$

$$= h \left[i \kappa \lambda' \frac{\partial}{\partial X_3} G'_{1j} (X_3, X'_3) + (\lambda' + 2\mu') \frac{\partial^2}{\partial X_3^2} G'_{3j} (X_3, X'_3) \right]_{X_3 = -0}$$

con j = 1, 2, 3.

Las funciones de Green que aquí se consideran pueden obtenerse mediante el método de Maradudin y Mills (1976) o el de García Moliner (1977). En las ecuaciones anteriores hemos supuesto que la onda se propaga en la dirección x, lo cual nos permite simplificar las expresiones sin pérdida de generalidad. En este caso las ecuaciones (2.17b) y (2.17e) se desacoplan de las restantes y dan origen a un modo con polarización transversal, análogo al modo Love considerado en §2.2. Las restantes ecuaciones corresponden a un modo con polarización sagital.

Utilizando las ecuaciones del movimiento (2.3) y las y las condiciones de continuidad (2.4), tras un cálculo directo pero laborioso, se obtienen, de manera análoga a como vimos en §2.2, las siguientes relaciones de dispersión:

a) Para el modo transversal, similar al modo Love

$$\mu q_{t} + \mu'' q_{t}'' = -h \left[\frac{\mu \mu''}{\mu'} q_{t} q_{t}'' + \mu' \kappa^{2} - \rho' \omega^{2} \right]. \qquad (2.18)$$

b) Para el modo contenido en el plano sagital la relación de dispersión se obtiene a partir del determinante secular

$$\begin{vmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & A_{14} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & A_{24} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} & A_{34} \\ A_{42} & A_{42} & A_{43} & A_{44} \end{vmatrix} = 0 \qquad (2.19)$$

siendo

$$A_{11} = 1 + h \frac{S_{\mu}}{\mu'} \frac{\kappa^2}{q_{+}} + h \frac{h}{\mu'} \frac{q_{+}}{q_{+}}$$
(2.20a)

$$\dot{A}_{12} = 1 + h \frac{S_{\mu}}{\mu} \frac{q}{k} + h \frac{h}{\mu} \frac{q}{q}$$
 (2.20b)

$$A_{43} = A_{14} = -1$$
 (2.20c)

$$A_{21} = \frac{i\kappa}{q_{t}} + i\kappa h \frac{\lambda + 2\mu - \delta\lambda}{\lambda' + 2\mu'}$$
(2.20d)

$$A_{22} = \frac{iq_2}{\kappa} - i\kappa h \frac{s\lambda}{\lambda' + 2\mu'} + ih \frac{\lambda + 2\mu}{\lambda' + 2\mu'} \frac{q_1^2}{\kappa} \qquad (2.20e)$$

$$A_{23} = \frac{i\kappa}{\mathbf{f}_{\pm}''} \tag{2.20f}$$

$$A_{24} = \frac{i \frac{g}{k}}{K}$$
 (2.20g)

$$A_{31} = -\left[\kappa \left(\frac{\kappa^2 + \frac{q_*}{2}}{\frac{q_*}{2}}\right) + h\left(\lambda' + \frac{\kappa'}{2}\right)\kappa^2 + \frac{\delta \lambda \cdot \lambda'}{(\lambda' + \frac{q_*}{2})}\kappa^2 + \frac{\lambda'(\lambda + \frac{q_*}{2})}{(\lambda' + \frac{q_*}{2})}\kappa^2 - \frac{\lambda'(\lambda' + \frac{q_*}{2})}\kappa^2 - \frac{\lambda'(\lambda' + \frac{q_*}{2})}{(\lambda' + \frac{q_*}{2})}\kappa^2 - \frac{\lambda'(\lambda' + \frac{q_*}{2}$$

$$A_{32} = - \left[2\mu \frac{q}{h} + h \left(\lambda' + 2\mu' \right) \kappa^2 + \frac{\lambda' \delta \lambda}{(\lambda' + 2\mu')} \kappa^2 - h \frac{\lambda' (\lambda + 2\mu)}{(\lambda' + 2\mu')} \frac{q^2}{h} - h \rho' \omega^2 \right] \quad (2.20i)$$

$$A_{33} = -\mu'' \frac{q_t''^2 + \kappa^2}{q_t''}$$
(2.20j)

$$A_{34} = -2/n'' \frac{\alpha}{h}''$$
(2.20k)

$$A_{44} = -2i\kappa_{\mu} - h\left(\mu\kappa^{2} - \rho'\omega^{2}\right)\frac{i\kappa}{q_{+}} - i\kappa h\mu q_{+} \qquad (2.201)$$

$$A_{42} = i\kappa \left[-\frac{\kappa^2 + q_{42}^2}{\kappa^2} - h \left(\mu \kappa^2 - \rho' \omega^2 \right) \frac{q_{42}}{\kappa^2} - h \mu \frac{q_{42}}{\kappa^2} \right] \qquad (2.20m)$$

$$A_{43} = 2i \kappa \mu''$$
 (2.20n)

A44 = ipt"K - K2 + 9"2 , (2, 200)con $\delta \mu = \mu - \mu'; \ \delta \lambda = \lambda - \lambda'.$

Estas relaciones de dispersión no admiten solución analítica y han de ser estudiadas numéricamente. Sin embargo, nuestro método supone una gran simplificación del problema general ya que en el caso del modo transversal reducimos el problema de un determinante (4x4) a un determinante (2x2) que permite obtener la ecuación (2.18) que resulta mucho más fácil de estudiar. Asímismo en el caso del modo sagital reducimos el problema de un determinante (8x8) a un determinante (4x4) con la consiguiente reducción de tiempo y ganancia de precisión en el proceso de cálculo numérico.

En el caso particular del defecto plano, que corresponde al esquema A/B/A, se producen notables simplificaciones con respecto al caso que hemos estudiado anteriormente y que permiten llegar a la obtención de soluciones analíticas.

Así, para el modo transversal la ec.(2.18) se reduce a

$$2\mu q_{t} = -h \left[\frac{\mu^{2}}{\mu^{2}} + \mu^{2} \kappa^{2} - \rho^{2} \omega^{2} \right], \qquad (2.21)$$

que admite una solución de la forma

$$\omega^{2} = G^{2} \kappa^{2} \left[I - (Ah\kappa)^{2} \right] , \qquad (2.22)$$

siendo

$$A = \frac{1}{2} \left(\frac{p'}{p} - \frac{\mu'}{\mu} \right). \qquad (2.23)$$

Para el modo contenido en el plano sagital es inmediato obtener a partir de las ecs. (2.20) los nuevos elementos A_{ij} (i,j = 1,2,3,4). En este caso se obtiene un modo localizado, por debajo del umbral transversal de volumen, cuya relación de dispersión está dada por la ec. (2.22), siendo ahora

$$A = \frac{\mu + (\frac{\mu'}{p} - 2)\mu'}{2\mu'}$$
 (2.24)

En el caso particular $\rho' = \rho$, que fué el estudiado por Kosevich y Khokhlov (1968), se obtiene

$$A = \frac{\mu - \mu'}{2\mu'},$$
 (2.25)

que coincide con el resultado por ellos obtenido, pero sin las ambiguedades inherentes a su planteamiento.

En el caso de un espesor h arbitrario, es preciso realizar un estudio numérico del determinante secular. Hemos considerado los dos tipos de sistemas Ni-Al (sin onda de Stonèley en la interfase) y W-Al (con onda de Stoneley). Se han considerado entonces los siguientes sistemas:

y en todos ellos se han encontrado modos localizados. Se ve por tanto que estos sistemas posibilitan la existencia de guías de onda, como ya se había apuntado anteriormente, incluso utilizando materiales para los cuales no se puede propagar una onda en su interfase.

2.4. Conclusiones

Nuestro estudio nos ha permitido clarificar las diversas aproximaciones normalmente utilizadas para estudiar: a) un estrato sobre un sustrato semi-infinito; b) una lámina de espesor arbitrario (pero finito) entre dos medios semi-infinitos y el caso particular del defecto plano.

Para el caso de espesor pequeño, hemos obtenido los resultados más generales posibles hasta el momento.

Hemos visto asímismo que el modelo de membrana equivalente proporciona un buen modelo de partida para estudiar de manera cualitativa los efectos asociados a que las propiedades de la superficie difieran de las de volumen. Dicho modelo serviría también para comprobar el límite de onda larga de modelos de dinámica de redes en los que se incluyen cambios en las constantes de interacción de las capas de superficie. Este es un hecho habitualmente ignorado en estos estudios y que no puede abordarse con los planteamientos clásicos de la teoría de la elasticidad. Nuestro estudio abre la posibilidad de realizar una investigación al menos de tipo cualitativo sobre estos aspectos.

El método aquí expuesto es fácilmente generalizable a otras simetrías. El caso más sencillo es el de un estrato de pequeño espesor de un medio isótropo depositado sobre la superficie (0001) de un cristal hexagonal semi-infinito. La relación de dispersión que se obtiene en este caso es muy complicada y habría de evaluarse numéricamente. Las conclusiones que se obtienen, no obstante, son análogas a las discutidas en §2.2.

Actualmente se realizan experimentos (Pouliquen et al. 1980) para determinar las variaciones en la frecuencia de las ondas Rayleigh debidas a la adsorción. Este nuevo método resulta ser sensible hasta la centésima de monocapa. Dicho método puede proporcionar por tanto un test para las predicciones teóricas.

Hemos demostrado asímismo que el caso del defecto

plano estudiado por Kosevich y Khokhlov (1968) corresponde al ca so de espesor pequeño para el medio B. Nuestros resultados se aplican a casos más generales que los estudiados por dichos autores, y asímismo nuestro kmétodo elimina las ambiguedades y dificultades de interpretación inherentes a su planteamiento. Los resultados obtenidos con el modelo de membrana equivalente se recuperan mediante el proceso límite indicado en las ecs. (2.11). Se ve por tanto que ambas aproximaciones corresponden a casos di ferentes, por lo cual no es sorprendente que los resultados obtenidos por ambos métodos sean diferentes. Esta situación no resultaba clara anteriormente (Velasco y García Moliner 1979b).

Como ya hemos discutido con anterioridad, estos sistemas presentan interés debido a su posible utilización en el diseño de guías de ondas acústicas. Estos dispositivos podrían realizarse uniendo el mismo material con diferentes tipos de colas (Poliquen, 1979).

40



LEYENDAS DE LAS FIGURAS

Fig.1.- Velocidad de las ondas de superficie en función de la dirección de propagación para la superficie (001) del Cu. T_1 y T_2 : umbrales transversales de volumen. Las cifras dan las diversas contribuciones al cambio total en la densidad de modos (para <u>k</u> fijo) debido a la superficie. El símbolo $\approx \delta$ representa una resonancia muy aguda, casi una función δ . El segmento grueso indica de manera aproximada el rango de frecuencias ($\omega = c\kappa$) sobre el cual se acumula la intensidad espectral medida por la cifra adyacente.



Fig.2.- $\Delta N^{S}(\underline{\kappa}, \omega)$ frente a ω (medida en unidades arbitrarias en las cuales κ = 1) para dos direcciones en la superficie (001) del Cu: (a) dirección |100|; (b) dirección |110|.





Fig.3.- Como en la Fig.2 pero para cuatro direcciones distintas de propagación: (a) θ = 25°; (b) θ = 30°; (c) θ = 35°; (d) θ = 40°.



Fundación Juan March (Madrid)



46

Fundación Juan March (Madrid)





Fig.4.- Contribución a la sección eficaz diferencial de "scattering" Brillouin medida por g_{33}^{s} para cuatro direcciones diferentes de $\underline{\kappa}$ en la superficie (001) del Si: (a) θ = 27°; (b) θ = 28°; (c) θ = 30°; (d) θ = 35°.



Fundación Juan March (Madrid)





Fundación Juan March (Madrid)



Fig.5.- Velocidades de las ondas de superficie en función de la dirección de propagación para la superficie (001) del Si. Las curvas teóricas se han obtenido a partir de la posición del pico dominante como se ve en la Fig.4. Cruces: datos de "scattering" Brillouin (Sandercock 1978) Círculos y cuadrados: datos obtenidos mediante "scattering" de ultrasonidos (Pratt y Lim 1969). La lí-

nea vertical indica la dirección aproximada donde una de las ramas debería cesar mientras la otra comenzaría a dominar.

BIBLIOGRAFIA

- Barkman J H, Anderson R L y Brackett T E, J. Chem. Phys., <u>42</u>, 1112 (1965)
- Barnett D M, Lothe J, Nishioka K y Asaro R T, J. Phys. F, <u>3</u>, 1083 (1973)
- Bennett B I, Maradudin A A y Swanson L R, Ann. Phys., <u>71</u>,357 (1972)
- Bortolani V, Nizzoli F y Santoro G, Phys. Rev. Lett., <u>41</u>,39 (1978a); J. Phys. F, 8, L215 (1978b)
- Bortolani V, Nizzoli F y Santoro G y Tosatti E, Solid Stat. COmmun., 26, 507 (1978c)
- Chen T S, Alldredge G P, de Wette F W y Allen R E, J. Chem. Phys 55, 3121 (1971)
- Dederichs P H y Leibfried G, Phys. Rev. 188, 1175 (1969)
- Djafari-Rouhani B y Dobrzynski L, Surface Sci., <u>61</u>, 521 (1976)
- Engan H, Ingebritsen K a y Tonning A, Appl. Phys. Lett., <u>10</u>, 311 (1967)
- Ewing W M, Jardetsky W S y Press F, Elastic waves in layered media (McGraw-Hill, N. Y., 1957)
- Fabelinski I L, Molecular scattering of light (Plenum, N.Y.1968)
- Farnell G W, en Physical acoustics Vol. VI, W.P. Mason Ed.
 - (Academic Press, N.Y, 1969) p. 109

García Moliner F, Ann. Physique, 2, 179 (1977)

García Moliner F, Flores F, Introduction to the theory of solid surfaces (Cambridge Univ. Press. 1979)

Inglesfield J E, J. Phys. C, 10, 4067 (1977)

Kittel C, Introduction to solid state physics (Wiley, N.Y. 4^a

edic., 1971)

- Kosevich A M y Khokhlov V I, Sov. Phys. Solid. Stat., <u>10</u>, 39
 (1968)
- Lean E G, Progress in optics Vol. 11, E. Wolff Ed. (North-Holland) Amsterdam, 1973) p. 124
- Lim T C y Farnell G W, J. Appl. Phys., <u>39</u>, 4319 (1968) Lim T C y Musgrave M J P, Nature, <u>225</u>, 372 (1970)

Lothe J y Al'shits I, Sov. Phys. Cristallog., 22, 519 (1977) Lothe J y Barnett D M, J. Appl. Phys., 47,428 (1976) Loudon R, Phys. Rev. Lett., 40, 581 (1978a); J. Phys. C., 11, 2623 (1978b) Loudon R y Sandercock J R, J. Phys. C., 13, 2609 (1980) Maradudin A A y Mills D L, Amn. Phys., 100, 262 (1976) Marshall F G, Solid'state Devices, Ins. Phys. Conf. Ser. Nº 40, 107 (1978) Murdoch A I, J. Mech. Phys. Solids, 24, 137 (1976) Overton W C y Swin R F, Phys. Rev,, 84, 758 (1951) Portz K y Maradudin A A, Phys. Rev. B, 16, 3535 (1977) Pouliquen J, comunicación privada (1979) Pouliquen J, Depoorter M y Defebvre A, E.C.O.S.S.3 (1980) Pratt R G y Lim T C, Appl. Phys. Lett., 15, 403 (1969) Price C W y Hirth J P, Surface Sci., 57, 509 (1976) Reif'F, Fundamentos de física estadística y térmica (Eds. del 2, Castillo, Madrid, 1967) Rollins F R, Jr., J. Acoust. Soc. Am., 44, 431(1968) Rollins F R, Jr., Lim T C y Farnell G W, Appl. Phys. Lett., <u>12</u>, 236 (1968) Rowell N L y Stegeman G I, Phys. Rev. B, 18, 2598 (1978) Sandercock J R, Solid Stat. Commun., 26, 547 (1978) Scholte J G, Mon. Not. R. Astron. Soc. Geophys. Suppl., 5, 120 ŧ, (1947)Stoneley R, Proc. R. Soc., A106, 416 (1924); Proc. R. Soc., A232, 447 (1955) Tejedor C, Louis E y Flores F, Solid Stat. Commun., 15, 587 (1974)Tiersten H F, J. Appl. Phys., 40, 770 (1969) Velasco V R y García Moliner F, Surface Sci., 67, 555 (1977); Surface Sci., 83, 376 (1979a); Physica Scripta, 20, 111 (1980a); J. Phys. C., 13, 2237 (1980b) Vermaak J S y Kuhlmann-Wilsdorf D, Structure and chemistry of solid surfaces, G. A. Somorjoai Ed. (J. Wiley, N.Y., 1969) Wassermann H J y Vermaak J S, Surface Sci., 32, 168 (1972)



FUNDACION JUAN MARCH SERIE UNIVERSITARIA

TITULOS PUBLICADOS

Serie Verde

(Matemáticas, Física, Química, Biología, Medicina)

- 2 Mulet, A.: Estudio del control y regulación, mediante un calculador numérico, de una operación de rectificación discontinua.
- 4 Santiuste, J. M.: Combustión de compuestos oxigenados.
- 5 Vicent López, J. L.: Películas ferromagnéticas a baja temperatura.
- 7 Salvá Lacombe, J. A.: Mantenimlento del hígado dador in vitro en cirugía experimental.
- 8 Plá Carrera, J.: Estructuras algebraicas de los sistemas lógicos deductivos.
- 11 Drake Moyano, J. M.: Simulación electrónica del aparato vestibular.
- 19 Purroy Unanua, A.: Estudios sobre la hormona Natriurética.
- 20 Serrano Molina, J. S.: Análisis de acciones miocárdicas de bioqueantes Beta-adrenérgicos.
- 22 Pascual Acosta, A.: Algunos tópicos sobre teoría de la información.
- 25 I Semana de Biología: Neurobiología.
- 26 I Semana de Biología: Genética.
- 27 I Semana de Biología: Genética.

- 28 Zugasti Arbizu, V.: Analizador diferencial digital para control en tiempo real.
- 29 Alonso, J. A.: Transferencia de carga en aleaciones binarias.
- 30 Sebastián Franco, J. L.: Estabilidad de osciladores no sinusoidales en el rango de microondas.
- 39 Blasco Olcina, J. L.: Compacidad numerable y pseudocompacidad del producto de dos espacios topológicos.
- 44 Sánchez Rodríguez, L.: Estudio de mutantes de saccharomyces cerevisiae.
- 45 Acha Catalina, J. I.: Sistema automático para la exploración del campo visual.
- 47 García-Sancho Martín, F. J.: Uso del ácido salicílico para la medida del pH intracelular.
- 48 García García, A.: Relación entre lones calcio, fármacos ionóforos y liberación de noradrenalina.
- 49 Trillas, E., y Alsina C.: Introducción a los espacios métricos generalizados.
- 50 Pando Ramos, E.: Síntesis de antibióticos aminoglicosídicos modificados.
- 51 Orozco, F., y López-Fanjul, C.: Utilización óptima de las diferencias genéticas entre razas en la mejora.

- 52 Gallego Fernández, A.: Adaptación visual.
- 55 Castellet Solanas, M.: Una contribución al estudio de las teorías de cohomología generalizadas.
- 56 Sánchez Lazo, P.: Fructosa 1,6 Bisfosfatasa de hígado de conejo: modificación por proteasas lisosomales.
- 57 Carrasco Llamas, L.: Estudios sobre la expresión genética de virus animales.
- 59 Afonso Rodríguez, C. N.: Efectos magneto-ópticos de simetría par en metales ferromagnéticos.
- 63 Vidal Costa, F.: A la escucha de los sonidos cerca de Tλ en el 4_{He} líquido.
- 65 Andréu Morales, J. M.: Una proteína asociada a membrana y sus subunidades.
- 66 Blázquez Fernández, E.: Desarrollo ontogénico de los receptores de membrana para insulina y glucagón.
- 69 Vallejo Vicente, M.: Razas vacunas autóctonas en vías de extinción.
- 76 Martín Pérez, R. C.: Estudio de la susceptibilidad magnetoeléctrica en el Cr₂O, policristalino.
- 80 Guerra Suárez, M.* D.: Reacción de Amidas con compuestos organoalumínicos.
- 82 Lamas de León, L.: Mecanismo de las reacciones de lodación y acoplamiento en el tiroldes.
- 84 Repollés Moliner, J.: Nitrosación de aminas secundarlas como factor de carcinogénesis ambiental.
- 86 II Semana de Biología: Flora y fauna acuáticas.

- 87 Il Semana de Biología: Botánica.
- 88 Il Semana de Biología: Zoología.
- 89 Il Semana de Biología: Zoología.
- 91 Viéitez Martín, J. M.: Ecología comparada de dos playas de las Rías de Pontevedra y Vigo.
- 92 Cortijo Mérida, M., y García Blanco, F.: Estudios estructurales de la glucógeno fosforilasa b.
- 93 Aguilar Benítez de Lugo, E.: Regulación de la secreción de LH y prolactina en cuadros anovulatorlos experimentales.
- 95 Bueno de las Heras, J. L.: Empleo de polielectrolitos para la floculación de suspensiones de partículas de carbón.
- 96 Núñez Alvarez, C., y Ballester Pérez, A.: Lixiviación del cinabrio mediante el empleo de agentes complejantes.
- 101 Fernández de Heredia, C.: Regulación de la expresión genética a nivel de transcripción durante la diferenciación de Artemia salina.
- 103 Guix Pericas, M.: Estudio morfométrico, óptico y ultraestructural de los inmunocitos en la enfermedad celíaca.
- 105 Llobera i Sande, M.: Gluconeogénesis «in vivo» en ratas sometidas a distintos estados tiroldeos.
- 106 Usón Finkenzeller, J. M.: Estudio clásico de las correcciones radiactivas en el átomo de hidrógeno.
- 107 Gallán Jiménez, R.: Teoría de la dimensión.
- 111 Obregón Perea, J. M.⁺: Detección precoz del hipotiroidismo congénito.

- 115 Cacicedo Egües, L.: Mecanismos moleculares de acción de hormonas tiroideas sobre la regulación de la hormona tirótropa.
- 121 Rodríguez García, R.: Caracterización de lisozimas de diferentes especies.
- 122 Carravedo Fantova, M.: Introducción a las Orquídeas Españolas.
- 125 Martínez-Almoyna Rullán, C.: Contribución al estudio de la Manometría Ano-rectal en niños normales y con alteraciones de la continencia anal.
- 127 Marro, J.: Dinámica de transiciones de fase: Teoría y simulación numérica de la evolución temporal de aleaciones metálicas enfriadas rápidamente.
- 129 Gracia García, M.: Estudio de cerámicas de interés arqueológico por espectroscopia Mössbauer.
- 131 García Sevilla, J. A.: Receptores opiáceos, endorfinas y regulación de la síntesis de monoaminas en el sistema nervioso central.
- 132 Rodríguez de Bodas, A.: Aplicación de la espectroscopía de RPE al estudio conformacional del ribosoma y el tRNA.
- 136 Aragón Reyes, J. J.: Interacción del Ciclo de los Purín Nucleótidos con el Ciclo del Acido Cítrico en Músculo Esquelético de Rata durante el Ejerciclo.
- 139 Genís Gálvez, J. M.: Estudio citológico de la retina del camaleón.
- 140 Segura Cámara, P. M.: Las sales de tiazolio ancladas a soporte polimérico insoluble como catalizadores en química orgánica.
- 141 Vicent López, J. L.: Efectos anómalos de transporte eléctrico en conductores a baja temperatura.

143 Nieto Vesperinas, M.: Técnicas de prolongación analítica en el problema de reconstrucción del objeto en óptica.

- 145 Arias Pérez, J.: Encefalopatía portosistémica experimental.
- 147 Palanca Soler, A.: Aspectos Faunísticos y Ecológicos de Carábidos Altoaragoneses.
- 150 Vioque Cubero, B.: Estudio de procesos bioquímicos implicados en la abscisión de la aceituna.
- 151 González López, J.: La verdadera morfología y fisiología de Azotobacter: células germinales.
- 152 Calle García, C.: Papel modulador de los glucocorticoides en la población de receptores para insulina y glucagón.
- 154 Alberdi Alonso, M.^a T.: Paleoecología del yacimiento del Neógeno continental de Los Valles de Fuentidueña (Segovia).
- 156 Gella Tomás, F. J.: Estudio de la fosforilasa kinasa de hígado y leucocitos: purificación, características y regulación de su actividad.
- 157 Margalef Mir, R.: Distribución de los macrofitos de las aguas dulces y salobres del E. y NE. de España y dependencia de la composición química del medio.
- 158 Alvarez Fernández-Represa, J.: Reimplantación experimental de la extremidad posterior en perros.
- 161 Tomás Ferré, J. M.*: Secreción y reutilización de trifosfato de adenosina (ATP) por sinaptosomas colinérgicos.
- 163 Ferrándiz Leal, J. M.: Estudio analítico del movimiento de rotación lunar.

164 Rubió Lols, M.; Urlz Lespe, M.[•] J., y Bibiloni Rotger, M.[•] A.: Contribución a la fauna de esponjas del litoral catalán. Esponjas córneas.



e Çir

Ψ,

ť

14.

Σŧ.

影

•

•