

Caracterización difractométrica rápida de texturas afiladas por modelación gaussiana

Luis Fuentes Cobas, Francisco Cruz Gandarilla, Juan García Rodríguez y Alberto Serra Jones
Facultad de Física, Universidad de La Habana

RESUMEN

Se propone una modificación al método de Harris para estimar la figura inversa de polos (FIP) correspondiente a la normal a la superficie de una muestra cuyo patrón de difracción ha sido tomado en la disposición de Bragg-Brentano. La modificación consiste en la modelación de la FIP como superposición de campanas gaussianas, ajustadas a la data experimental según un criterio de mínimos cuadrados. Se describen los programas de computadora con los cuales se ha sistematizado el procedimiento. Se presenta un ejemplo de aplicación del método.

ABSTRACT

A modification to the Harris' Method of Inverse Pole Figure (IPF) estimation is proposed. IPF corresponding to the normal to sample surface in Bragg-Brentano configuration is considered. The propose modification consists of the representation of textures as a superposition of gauss-like surfaces, fitting the experimental data according to a least-squares algorithm. The associated computer programs are described. An application example is presented.

INTRODUCCIÓN

El problema fundamental del análisis de texturas es la determinación de la Función de Distribución de Orientaciones (FDO) que caracteriza estadísticamente la estructura orientacional del policristal considerado. La solución de esta tarea, también llamada *Inversión de las Figuras de Polos*,

permite la predicción teórica y la optimización de las propiedades físicas de materiales texturados, los estudios fundamentales de transformaciones estructurales en aleaciones, cerámicas y semiconductores y la investigación geofísica de procesos de metamorfismo en rocas.

El método habitual de obtención de la FDO en los laboratorios de difracción de rayos X o neutrones consiste en la medición con un goniómetro de textura de las Figuras de Polos (FP) y el ulterior tratamiento computarizado de estas para calcular los coeficientes del desarrollo en armónicos esféricos generalizados de la FDO.

La realización completa de esta tarea puede tomar desde días hasta meses en dependencia, fundamentalmente, de la simetría de la muestra y de sus cristales.

La Figura Inversa de Polos (FIP) da una caracterización alternativa de la textura la cual contiene una información importante sobre la estructura del policristal. El promedio policristalino de propiedades físicas uniaxiales (módulo de Young por ejemplo) se obtiene directamente de la FIP asociada a la dirección de interés.

En texturas de fibras, la FIP es equivalente a la FDO. Normalmente la FIP se obtiene del mismo juego de coeficientes de la FDO calculados a partir de las FP.

En este trabajo se propone un método computarizado, rápido y sencillo, de estimar la FIP correspondiente a la normal a la superficie de la muestra a partir del patrón difractométrico obtenido por reflexión de los rayos-x o neutrones en dicha superficie. El método es válido si la textura está formada por la superposición de unas pocas componentes bien definidas.

La utilidad del método es máxima en texturas de fibras afiladas, donde se puede llegar a resolver el problema del análisis de textura en un tiempo de medición del orden de un 10 % del tiempo necesario para el método de medición de las FP. Además no es necesario el uso de un goniómetro de textura.

FUNDAMENTACIÓN DEL MÉTODO, ALGORITMO Y PROGRAMAS

Sea un policristal cualquiera. La función de distribución de orientaciones $f(g)$ está definida en el espacio G de las orientaciones de Euler, de modo que /1/:

$$\int_G f(g) dg = 1, \quad dg = \frac{1}{8\pi^2} \sin \phi \, d\phi_1 \, d\phi \, d\phi_2 \quad (1)$$

con

$$G: 0 \leq \phi_1, \phi_2 \leq 2\pi, \quad 0 \leq \phi \leq \pi \quad (2)$$

Si todas las cristalitas poseen igual forma y tamaño, entonces $f(g)$ es la densidad de probabilidad para una cristalita de la muestra, de poseer la orientación g .

Si la distribución de orientaciones posee la llamada simetría de fibra, entonces $f(g)$ resulta independiente del ángulo ϕ_1 . Para este caso, a partir de $f(g)$ se obtiene /2/ como caracterización bidimensional de la textura a la Figura Inversa de Polo $R(\vec{h})$ asociada al eje de simetría de fibra de la muestra. Por definición la FIP es la integral de $f(g)$ por todas las orientaciones de G para las cuales la dirección cristalina \vec{h} es paralela a la dirección de muestra \vec{y} , con \vec{y} constante. $R(\vec{h})$ da la densidad de probabilidad de que las diferentes direcciones cristalinas \vec{h} sean paralela a una dirección determinada en la muestra. En nuestro caso la dirección seleccionada es la del eje de fibra ($\vec{y}=\vec{0}$).

Para texturas de fibra, el método habitual de determinar $R(\vec{h})$ es a través de la medición de las figuras de polo $\hat{P}_h(\theta, \phi)$ y la obtención a partir de esta de los coeficientes C_1^m del desarrollo en armónicos esféricos Y_1^m de la FIP. En fórmulas:

$$R(\vec{h}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} C_1^m Y_1^m(\vec{h}) \quad (3)$$

Harris /3/ ha introducido un método rápido de estimar la FIP midiendo solamente los puntos correspondientes al eje de fibra de las figuras de polos. Este método propone para R evaluada en la dirección \vec{h}_i la aproximación:

$$R(\vec{h}_i) = \frac{\hat{P}_{h_i}^{\vec{y}}(0)}{\hat{P}_{h_i}^{\vec{y}}(0)_r} \bigg/ \sum_i \frac{\hat{P}_{h_i}^{\vec{y}}(0)}{\hat{P}_{h_i}^{\vec{y}}(0)_r} \Delta S_i \quad (4)$$

donde:

$\hat{P}_{h_i}^{\vec{y}}(0)$ = intensidad del pico \vec{h}_i en la orientación $\vec{y}=\vec{0}$, con la muestra texturada.

$\hat{P}_{h_i}^{\vec{y}}(0)_r$ = intensidad correspondiente a la anterior, con la muestra sin textura.

ΔS_i = elemento de superficie de la esfera polar en el entorno de \vec{h}_i .

Empleando (4) es posible representar la FIP de manera aproximada, en tantos puntos como máximos de Bragg se determinen en un experimento de difracción simétrica por reflexión (disposición de Bragg-Brentano).

Conocida la FIP en un número limitado de puntos debe resolverse entonces el problema de encontrar la superficie $R(\vec{h})$ que mejor represente la data experimental. Bunge /2/ propone el desarrollo en armónicos esféricos (3), donde es posible hallar los primeros coeficientes C_1^m a partir de los $R(\vec{h}_i)$ conocidos.

Aquí sugerimos adoptar una tendencia actual empleada en el análisis de las llamadas *Texturas Fantasma*, consistente en representar la FIP mediante funciones modelo /4/, y buscar específicamente la superposición de superficies gaussianas que mejor se ajuste al conjunto de puntos $R(\vec{h}_i)$ dados, según un algoritmo de mínimos cuadrados.

El algoritmo propuesto ha sido sistematizado con los programas MODEL y REDUC escritos en lenguajes MS-FORTRAN y BASIC-N88. Estos se ejecutan en microcomputadoras NEC PC-9801F con 256kB, el diagrama de bloques de MODEL se muestra en la figura 1. El esquema general de trabajo es como sigue: Se representa la figura inversa de polos mediante la superposición de un número limitado de campanas gaussianas cuyo solapamiento mutuo es despreciable. La expresión matemática de estas componentes es la siguiente:

$$Y(\vec{h}) = Y(\theta, \varphi) = Y_0 \exp(-B\beta^2) \quad (5)$$

donde Y_0 es la intensidad y B se asocia al semiancho w según:

$$w = \sqrt{\frac{0.693}{B}}$$

β es la distancia angular entre el punto de observación \vec{h} y el centro de la componente considerada.

La medición de intensidades $\hat{P}_{\vec{h}_i}^+(0)$ en la muestra texturada y $\hat{P}_{\vec{h}_i}^+(0)_r$ en una muestra aleatoria permite proponer para la FIP una función del tipo (5) (o una superposición de tales funciones) de modo que la superficie modelo se aproxime satisfactoriamente a todos los puntos examinados. Se exige que:

$$\sum_{i=1}^N \{ \ln(Y_i^{\text{exp}}/Y_0) + B\beta_i^2 \}^2 \quad (7)$$

sea un mínimo respecto de variaciones en Y_0 y B . Aquí:

$$Y_i^{\text{exp}} = \hat{P}_{\vec{h}_i}^+(0) / \hat{P}_{\vec{h}_i}^+(0)_r \quad (8)$$

El programa MODEL resuelve esta tarea a partir de la colección de Y_i^{exp} dados por el experimento. Habiendo determinado los parámetros de las diferentes componentes de la textura, se efectúa la superposición para calcular la FIP resultante. Se halla el factor de discrepancia R :

$$R = \frac{\sum |Y_i^{\text{exp}} - Y_i^{\text{teo}}|}{\sum Y_i^{\text{exp}}} \cdot 100$$

y se le da al investigador la opción de afinar en el caso de gaussianas solapadas el ajuste mediante modificación iterativa de los parámetros de entrada. Una vez obtenida una coincidencia satisfactoria entre los datos experimentales y la modelación se norma la FIP y se grafica en el impresor.

MODEL y REDUC admiten simetrías cristalinas cúbicas, hexagonales y tetragonales. Han proporcionado resultados satisfactorios en texturas de mediana intensidad formada por la superposición de hasta 3 picos.

APLICACIÓN

El método propuesto ha sido aplicado a textura de fibra de materiales con estructura cristalina cúbica, tetragonal y hexagonal. Los resultados han sido comparados con los obtenidos por el método habitual de las figuras de polos /5//6//7/ coincidiendo satisfactoriamente con estos en todos los casos de texturas afiladas. Como ilustración exponemos a continuación el caso del Zirconio presentado en /7/.

En esta referencia la muestra bajo estudio fue examinada por difracción neutrónica de tiempo de vuelo, midiéndose sus figuras de polos con el empleo de un goniómetro de textura. Siguiendo el método de Bunge se determinaron los coeficientes de textura C_1^m y de ahí se sintetizó la FIP, que se reproduce en la figura 2.

Para aplicar el método aquí propuesto se tomaron las intensidades difractadas asociadas al eje de fibra de la muestra texturada y se dividieron por las correspondientes a una muestra aleatoria. Los valores así obtenidos fueron ploteados en la proyección estereográfica del triángulo irreducible de la simetría hexagonal obtenido con el programa REDUC el cual se muestra en la figura 3. Dando estos datos al programa MODEL se obtuvo la figura 4. La semejanza de esta con la figura 2 es evidente.

El factor de discrepancia entre los datos experimentales y la función modelo de la figura 4 es $R = 16 \%$.

La presentación de esta aplicación vale como muestra de las posibilidades del método propuesto.

COMENZAR

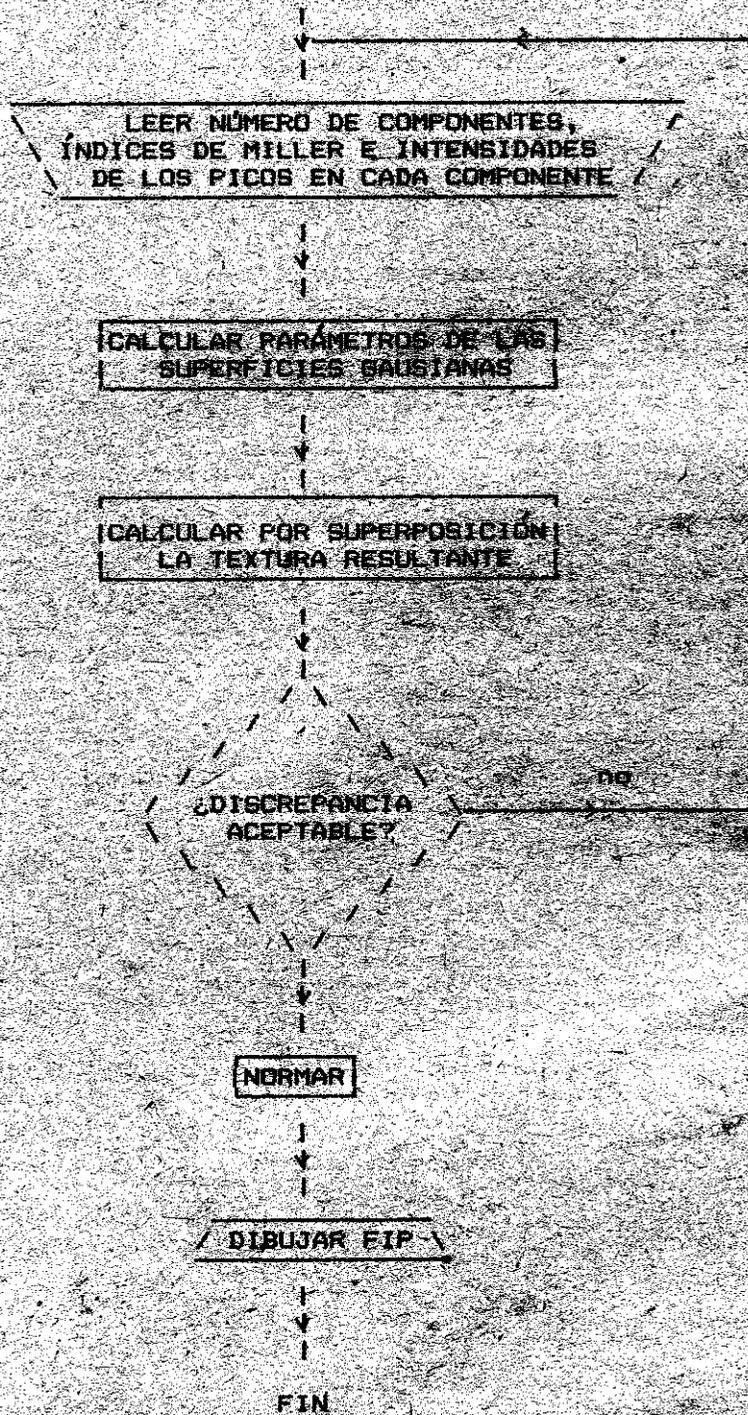


Diagrama de bloque del programa MODEL

Tabla de símbolos gráficos para la figura 2.

:	"MUY DEBIL"	DESDE	- .13	HASTA	.95
.	"DEBIL"	DESDE	.95	HASTA	2.03
:	"MEDIA"	DESDE	2.03	HASTA	3.11
/	"FUERTE"	DESDE	3.11	HASTA	4.19
X	"MAXIMA"	DESDE	4.19	HASTA	5.27

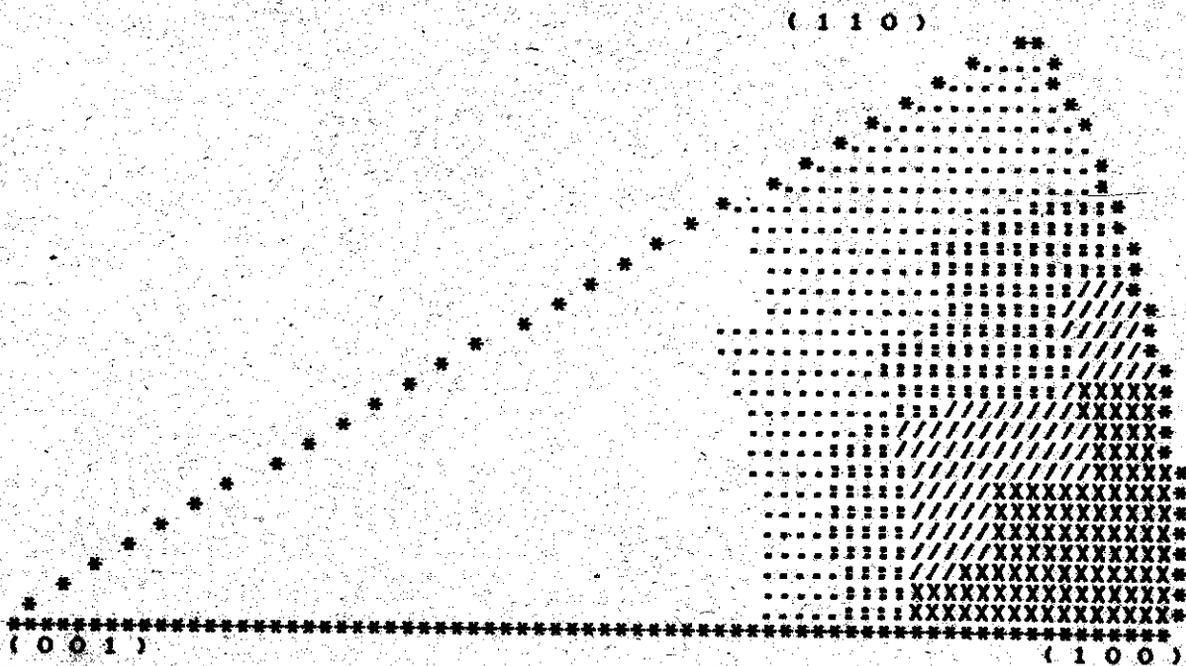


Figura 2. FIP obtenida según Bunge

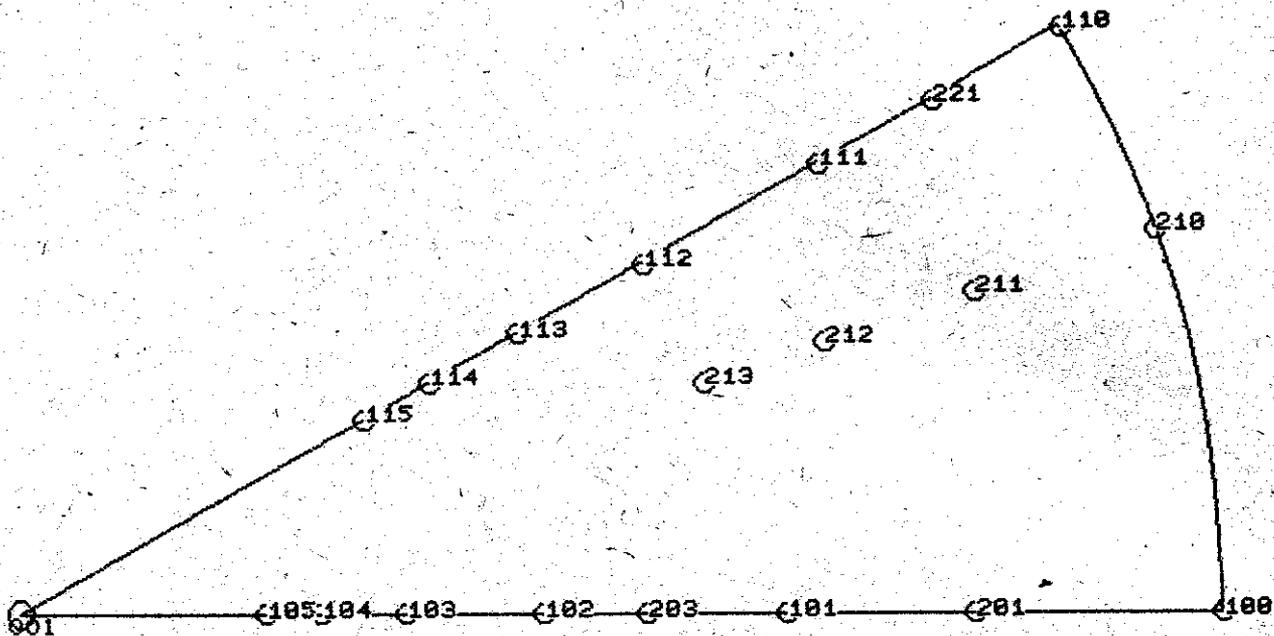


Figura 3. Zona irreducible para el sistema hexagonal obtenida con el programa REDUC

Tabla de símbolos gráficos para la figura 4.

:	"MUY DEBIL"	DESDE	.00	HASTA	.94
.	"DEBIL"	DESDE	.94	HASTA	1.88
:	"MEDIA"	DESDE	1.88	HASTA	2.82
/	"FUERTE"	DESDE	2.82	HASTA	3.76
X	"MAXIMA"	DESDE	3.76	HASTA	4.70

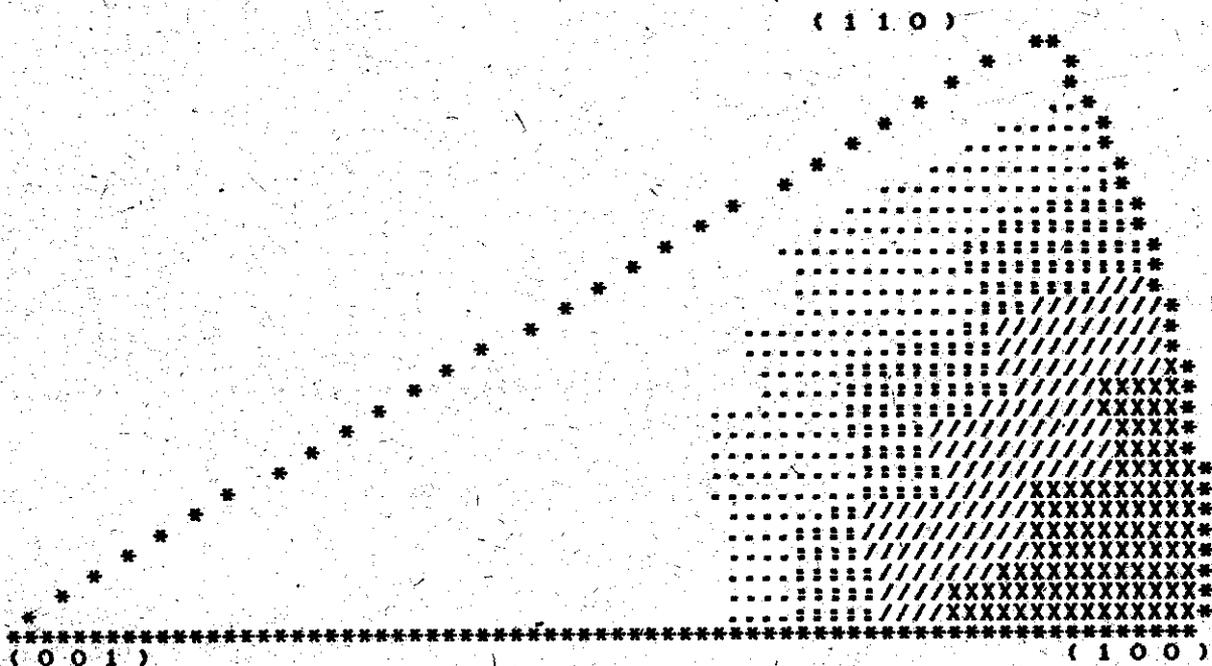


Figura 4. FIP obtenida con el programa MODEL

BIBLIOGRAFÍA

- /1/ Matthies, S. y K. Melming
Phys. Stat. Sol. (b) 113, 569 (1982).
- /2/ Bunge, H.J.
Texture Analysis in Materials Science. p. 53. Ed. Butterworths
(1969).
- /3/ Harris, G.B.
Phil. Mag. 43, 113 (1952).
- /4/ Matties, S.
Phys. Stat. Sol. (b) 112, 705 (1982).
- /5/ Fuentes, L.; K. Walthes; K. Felmann; L.P. Drechsler; E.N. Vlasova;
V.I. Matorin y M. Betzl
Crystal Res. & Technol. 20, 179 (1985).
- /6/ Walter, K. y J. Dörfel
Investigation of Texture Formation for Body-Centred Cubic Metals /
Model Calculations / P17-84-452. Communication of the Joint
Institute for Nuclear Research. Dubna (1984).
- /7/ Feldmann, K.; M. Betzel; K. Walther y W. Matz
Crystal Research and Technology 16, 1165 (1981).

Los efectos de saturación en la línea de absorción Mössbauer

I. Un algoritmo para su tratamiento numérico

E. Reguera y C. Díaz, Centro Nacional de Investigaciones Científicas

RESUMEN

Se dan expresiones analíticas para la evaluación numérica de los efectos de saturación en los parámetros de la línea de absorción Mössbauer. Las líneas de la fuente y del absorbente se han supuesto Lorentzianas. Mediante esas ecuaciones y un patrón interno es posible determinar el factor Mössbauer-Lamb del absorbente.

ABSTRACT

Analytical equations are given for numerical evaluation of the saturation effects in the Mössbauer absorption line parameters. The source and absorber lines are assumed to be Lorentzian. By means of these equations and an internal standard, the absorber Mössbauer-Lamb factor can be measured.

INTRODUCCIÓN

En las técnicas analíticas en las que midamos la transmisión (o dispersión) de un haz de partículas o radiación a través de la muestra analizada, generalmente encontramos Efectos de Saturación que dificultan la determinación cuantitativa de la población de aquellos elementos que interaccionan con el haz incidente. Tales determinaciones en principio son posibles a través de mediciones de la intensidad de la señal a que dicha interacción da lugar.

Estos efectos son una consecuencia de que no toda la población capaz de interactuar con el haz incidente, está en igualdad de posibilidades para hacerlo. En espectroscopia Mössbauer en particular, la saturación debida al espesor finito del absorbente, afecta a todos los parámetros de la línea de absorción resonante, es decir, a su área, amplitud, semi-ancho y centroide, y por consiguiente a la forma misma de la línea (tipo de función capaz de describirla). De estos parámetros, el menos afectado es el centroide, el que en la mayoría de los problemas prácticos puede suponerse independiente del espesor del absorbente.

El isótopo gamma-resonante en una muestra dada, puede encontrarse distribuido en posiciones estructuralmente no equivalentes y/o con más de una valencia. Esto origina que dicho isótopo puede estar en un número "NSM" de estados energéticamente diferentes. Cada uno de estos últimos a su vez puede desdoblarse en varios subestados en dependencia de los campos que interactúan con los núcleos resonantes, como ocurre por ejemplo en la transición $1/2 \rightarrow 3/2$ para el ^{57}Fe en una fase con ordenamiento magnético, en que a cada uno de sus estados le es característico un espectro de seis líneas (sexteto).

En este trabajo se presenta un tratamiento simplificado a los efectos de saturación en el área de la línea de absorción Mössbauer, con el propósito de facilitar la determinación cuantitativa de la población del isótopo resonante en los diferentes estados en la muestra analizada. Este tratamiento, se fundamenta en expresar el área de la línea como el producto de dos factores ⁽¹⁾: un factor "A1" que depende linealmente de la concentración del isótopo resonante en el estado estudiado, y un segundo factor "TS" que mide en cuanto la saturación desvía al área experimentalmente medida del comportamiento ideal dado por el primer factor.

CÁLCULO DEL FACTOR DE SATURACIÓN

Cuando el ensanchamiento de la sección eficaz de absorción es del tipo Lorentziano, el área de la línea de absorción puede expresarse como ⁽¹⁾:

$$A = A_0 \cdot TS \quad (1)$$

donde

$$A_0 = \frac{1}{2} f_s \pi \Gamma_n t \quad (2)$$

$$TS = \exp \left[- \frac{\Gamma_n}{\Gamma_a} \cdot \frac{t}{2} \right] \left[I_0 \left(\frac{\Gamma_n}{\Gamma_a} \cdot \frac{t}{2} \right) + I_1 \left(\frac{\Gamma_n}{\Gamma_a} \cdot \frac{t}{2} \right) \right] \quad (3)$$

El significado de los símbolos que aparecen en las ecuaciones (2) y (3) es el siguiente:

f_s : factor Mössbauer-Lamb de la fuente;

t : espesor específico del absorbente;

Γ_n : semi-ancho natural de la línea Mössbauer;

Γ_a : semi-ancho de la sección eficaz de absorción Mössbauer del absorbente;

I_0 : función de Bessel de orden cero con argumento imaginario;

I_1 : función de Bessel de orden uno con argumento imaginario.

En la tabla I se dan los valores que se obtienen para TS cuando la expresión (3) se evalúa para diferentes valores de " t " y " Γ_a ".

Tabla I
Valores de TS en función de " t " y " Γ_a ".

t	TS							
	Γ_a/Γ_n							
	1	1,5	2	4	6	8	10	
0,01	0,9975	0,9983	0,9988	0,9994	0,9996	0,9997	0,9998	
0,10	0,9756	0,9836	0,9877	0,9938	0,9959	0,9969	0,9975	
1,00	0,8015	0,8577	0,9412	0,9511	0,9600	0,9697	0,9756	
2,00	0,6737	0,7529	0,8015	0,8891	0,9232	0,9412	0,9524	
4,00	0,5238	0,6122	0,6737	0,8015	0,8577	0,8891	0,9092	
6,00	0,4398	0,5238	0,5865	0,7310	0,8015	0,8428	0,8700	
8,00	0,3857	0,4634	0,5238	0,6737	0,7529	0,8015	0,8342	
10,00	0,3475	0,4194	0,4766	0,6232	0,7107	0,7644	0,8015	

En espectroscopia Mössbauer es frecuente el empleo del término *absorbente delgado* para designar aquellas condiciones en las cuales el espesor de la muestra es tal que los efectos de saturación son despreciables. Sin embargo, cuando el absorbente puede ser considerado delgado ($TS = 1$), es necesario tomar en cuenta otro efecto no menos importante, la no homogeneidad en el espesor del absorbente⁽²⁻³⁾, cuyo tratamiento no es menos difícil que el debido a la saturación. De modo que en cualquier caso, para el empleo de espectroscopia Mössbauer con fines de análisis cuantitativo en población de sitios, es necesario someter el espectro experimental a una rigurosa elaboración numérica, que generalmente se puede reducir a una combinación de correcciones por saturación y desdoblamiento del espectro en sus líneas componentes.

Supongamos que se tiene una muestra en la cual el isótopo gamma-resonante se encuentra distribuido en NSM estados y deseamos determinar qué fracción del total de estos isótopos se encuentra en el i -ésimo estado. Supongamos además, que el solapamiento y el espesor del absorbente son tales que en

una primera aproximación podemos tratar los efectos de saturación en cada línea por separado. Para ello es necesario en primer lugar, obtener el factor de saturación TS(I) para cada una de dichas líneas. El valor de TS(I) se puede obtener registrando dos espectros de la misma muestra y bajo las mismas condiciones experimentales. El primero con una densidad superficial del elemento Mössbauer igual σ_1 (g/cm²) y el segundo con $\sigma_2 = Q\sigma_1$ (g/cm²). Si ahora tomamos en consideración las expresiones (2) y (3), la relación entre las áreas experimentales "Ae(I)" de la línea correspondiente al i-ésimo estado será:

$$\frac{Ae_2(I)}{Ae_1(I)} = Q \frac{TS(Q \cdot X(I))}{TS(X(I))} \quad (4)$$

donde

$$X(I) = \frac{\Gamma_n}{\Gamma_a(I)} \cdot \frac{t(I)}{2}$$

El valor "Xr(I)" que satisface la ecuación (4) se obtiene determinando la raíz de la función dada por,

$$F(x) = Q \cdot \frac{TS(QX)}{TS(X)} - \frac{Ae_2(I)}{Ae_1(I)} = 0 \quad (5)$$

Al determinar el valor de "Xr(I)", quedan determinados los valores TS/Xr(I) y TS(QXr(I)), y por tanto los valores lineales de las áreas experimentales "A_{le}(I)" se obtienen según:

$$A_{le_1}(I) = \frac{Ae_1(I)}{TS(Xr(I))} \quad (6a)$$

$$A_{le_2}(I) = \frac{Ae_2(I)}{TS(QXr(I))} \quad (6b)$$

De modo que la fracción de isótopos resonantes en el i-ésimo estado se determina mediante:

$$f(I) = \frac{A_{le}(I)/fa(I)}{NSM \sum_{J=1} (A_{le}(J)/fa(J))}$$

siendo fa(I) el factor Mössbauer-Lamb correspondiente a dicho estado.

El valor de fa(I) no es posible calcularlo a partir de los datos anteriores debido a que A_{le}(I) y Xr(I) no son variables independientes. El caso NSM = 1 es una excepción.

Para determinar el valor de "fa" se puede emplear alguno de los métodos reportados en la literatura⁽²⁻¹²⁾ o emplear el presente algoritmo en combinación con un estándar interno. Es decir, preparando una mezcla de proporción conocida entre la muestra a la que se le desea determinar el factor Mössbauer-Lamb "fa" y una sustancia patrón para la cual se conozca dicho factor.

DETERMINACIÓN DE Γ_a

Este es un parámetro que tiene importancia en el estudio de algunos fenómenos dinámicos en espectroscopia Mössbauer, tales como difusión del isótopo resonante, fenómenos de relajación, etcétera.

Para determinar el valor de Γ_a es suficiente estudiar la dependencia del semi-ancho de la línea experimental con Γ_a . Por semi-ancho de la línea se entiende el ancho de la línea tomado a la semi-altura del máximo de absorción resonante.

La ordenada de la señal de absorción Mössbauer para cada valor de la energía Doppler "S" impartida a la fuente viene dada por la Integral de Transmisión, que para el caso que nos ocupa se expresa como ⁽¹⁾:

$$\xi = f_s \left[1 - \frac{\Gamma_s}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{(E+S-E_0)^2 + (\frac{1}{2}\Gamma_s)^2} \exp \left(- \frac{\frac{1}{4}t \Gamma_a \Gamma_n}{(E-E_a)^2 + (\frac{1}{2}\Gamma_a)^2} \right) \right] \quad (8)$$

donde Γ_s : es el semi-ancho de la línea de la fuente.

Introduzcamos los siguientes cambios de variable en la expresión (8):

$$T = \frac{\Gamma_n}{\Gamma_a} t \quad \delta = \frac{2(E_a - E_s)}{\Gamma_s} = \frac{2 S_0}{\Gamma_s}$$

$$y = \frac{2(E - E_s)}{\Gamma_s} \quad \gamma = \frac{\Gamma_s}{\Gamma_a} \quad z = \frac{2S}{\Gamma_s}$$

con lo cual se transforma en:

$$\xi(z) = f_s \left[1 - \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{(y+z)^2 + 1} \exp \left(- \frac{T}{(y-\delta)^2 \gamma^2 + 1} \right) \right] \quad (9)$$

El valor de "δ" mide la energía de los núcleos resonantes respecto a la fuente en unidades del semi-ancho de la línea de emisión. Es decir, "δ" es proporcional al corrimiento isomérico de los núcleos resonantes respecto a la fuente.

Con los cambios de variables anteriores, el cálculo del semi-ancho "Γ" de la línea de absorción se reduce a computar el valor de "zr" que es raíz de la función F(z) dada por

$$F(z) = \xi(z) - \frac{1}{2} \xi(0) = 0 \quad (10)$$

y luego tomar en cuenta que $\Gamma = z_r \Gamma_s$

Sustituyendo (9) en (10) y reagrupando se obtiene,

$$F(z) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} dy \left[\frac{1}{(y+z)^2 + 1} + \frac{1}{(y-z)^2 + 1} - \frac{1}{y^2 + 1} \right] \exp \left(- \frac{T}{(y\gamma)^2 + 1} \right) - \frac{1}{2} = 0 \quad (11)$$

DETERMINACIÓN DE Γ_a

Este es un parámetro que tiene importancia en el estudio de algunos fenómenos dinámicos en espectroscopia Mössbauer, tales como difusión del isótopo resonante, fenómenos de relajación, etcétera.

Para determinar el valor de Γ_a es suficiente estudiar la dependencia del semi-ancho de la línea experimental con Γ_a . Por semi-ancho de la línea se entiende el ancho de la línea tomado a la semi-altura del máximo de absorción resonante.

La ordenada de la señal de absorción Mössbauer para cada valor de la energía Doppler "S" impartida a la fuente viene dada por la Integral de Transmisión, que para el caso que nos ocupa se expresa como ⁽¹⁾:

$$\xi = f_s \left(1 - \frac{\Gamma_s}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{(E+S-E_0)^2 + (\frac{1}{2}\Gamma_s)^2} \exp \left[- \frac{\frac{1}{4}t \Gamma_a \Gamma_n}{(E-E_a)^2 + (\frac{1}{2}\Gamma_a)^2} \right] \right) \quad (8)$$

donde Γ_s : es el semi-ancho de la línea de la fuente.

Introduzcamos los siguientes cambios de variable en la expresión (8):

$$\begin{aligned} T &= \frac{\Gamma_n}{\Gamma_a} t & \delta &= \frac{2(E_a - E_s)}{\Gamma_s} = \frac{2 S_0}{\Gamma_s} \\ y &= \frac{2(E - E_s)}{\Gamma_s} & \gamma &= \frac{\Gamma_s}{\Gamma_a} & z &= \frac{2S}{\Gamma_s} \end{aligned}$$

con lo cual se transforma en:

$$\xi(z) = f_s \left(1 - \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{(y+z)^2 + 1} \exp \left[- \frac{T}{(y-\delta)^2 \gamma^2 + 1} \right] \right) \quad (9)$$

El valor de " δ " mide la energía de los núcleos resonantes respecto a la fuente en unidades del semi-ancho de la línea de emisión. Es decir, " δ " es proporcional al corrimiento isomérico de los núcleos resonantes respecto a la fuente.

Con los cambios de variables anteriores, el cálculo del semi-ancho " Γ " de la línea de absorción se reduce a computar el valor de " z_r " que es raíz de la función $F(z)$ dada por

$$F(z) = \xi(z) - \frac{1}{2} \xi(0) = 0 \quad (10)$$

y luego tomar en cuenta que $\Gamma = z_r \Gamma_s$

Sustituyendo (9) en (10) y reagrupando se obtiene,

$$F(z) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} dy \left[\frac{1}{(y+z)^2 + 1} + \frac{1}{(y-z)^2 + 1} - \frac{1}{y^2 + 1} \right] \exp \left[- \frac{T}{(y\gamma)^2 + 1} \right] - \frac{1}{2} = 0 \quad (11)$$

donde se ha omitido la dependencia con " δ " pues es bien conocido que el semi-ancho de la línea de absorción es independiente de su centroide.

Para determinar el valor $\Gamma_a(I)$ correspondiente al i -ésimo estado para el isótopo resonante, es suficiente determinar el valor " $\gamma_n(I)$ " que satisface (11) con

$$T = 2Xr(I)$$

$$z = \frac{\Gamma_e(I)}{\Gamma_s}$$

Para efectuar la corrección sobre la amplitud de la línea es necesario resolver la integral (8) por métodos numéricos empleando los parámetros derivados al resolver las ecuaciones (5) y (11).

CONCLUSIONES

La principal ventaja del algoritmo anterior para el tratamiento de los efectos de saturación en espectroscopia Mössbauer radica en su sencillez. El mismo puede implementarse sobre una computadora personal, frecuentes en los laboratorios analíticos, estando el tiempo de ejecución determinado por las exigencias de exactitud impuestas en la ejecución del programa. El procedimiento anterior se ha empleado conjuntamente con programas de ajustes por mínimos cuadrados, en la elaboración inicial de los datos de otro programa de refinamiento por resolución de la Integral de Transmisión.

BIBLIOGRAFÍA

1. Reguera, E.

Revista de Ciencias Químicas, Vol. 17, Nos. 3-4, 1986.

2. Belogurov, V.N. and V.A. Bilinkin

Nucl. Instr. and Meth. 175, 495 (1980).

3. Kansy, J.; T.J. Panek and Szuszkiewicz, M.

Physica Status Solidi A 80, 643(1983).

4. Fritzsche, E. and H. Kubsch

Radiochem. Radioanal. Lett. 55, 331(1982).

5. Margulies, S. and J.R. Ehrman

Nucl. Instr. and Meth. 12, 131(1961).

6. O'Connor, D.A. and G. Longworth

Nucl. Instr. and Meth. 30, 290(1964).

7. O'Connor, D.A. and G. Skyrme

Nucl. Instr. and Meth. 106, 77(1973).

8. Housley, R.M.; N.E. Erickson and J.G. Dash

Nucl. Instr. and Meth. 27, 29(1964).

9. Johnson, D.P.
Nucl. Instr. and Meth. 85, 29(1970).
10. Hannaford, P. and R.G. Horn
J. Phys. C6, 2223 (1973)
11. Manouchev, B.; Ts. Bonchev and S. Ivanov
Nucl. Instr. and Meth. 136, 261(1976).
12. Ball, J. and S.J. Lyle
Nucl. Instr. and Meth. 163, 177(1979).

Expresiones analíticas para los modelos cinéticos de crecimiento por nucleación y nucleación-cristalización

Ma Magdalena Romero R., Instituto Superior Minero Metalúrgico, Moa, Holguín
Julio César Llópiz Y., Facultad de Química, Universidad de La Habana

RESUMEN

Se propone la forma que debe tomar la función $g(\alpha)$ para los modelos cinéticos de crecimiento por nucleación y nucleación-cristalización. Esta se confirma por la compatibilidad de los resultados al generalizar la ecuación de Kissinger por dos métodos diferentes.

ABSTRACT

The possible form of the $g(\alpha)$ function for nucleation and nucleation-cristallization growth kinetical models is proposed. This is confirmed from the agreement with the results obtained by the generalization of Kissinger's equation from two different methods.

INTRODUCCIÓN

Para la descripción de las reacciones, en las cuales interviene al menos una fase sólida, se utilizan diferentes modelos cinéticos caracterizados por las funciones $f(\alpha)$ y $g(\alpha)$.

Los mecanismos que responden a la ecuación de Avrami, y que describen el crecimiento de los núcleos, se reportan [4,5] por lo general con la función

$$g(\alpha) = [-\ln(1-\alpha)]^{1/n} \quad (1)$$

donde n es el coeficiente de Avrami y puede ser igual a 1, 4/3, 3/2, 2, 3, etcétera según la nucleación.

Šesták [1] propone la forma:

$$g(\alpha) = \frac{1}{n} [-\ln(1-\alpha)]^{1/n} \quad (2)$$

Para los crecimientos bidimensional y tridimensional en los casos de velocidad de nucleación constante con incremento lineal de los núcleos; $n = 2, 5/2$, para los modelos (G2, G7) y de velocidad de nucleación cero sin incremento del número de núcleos $n=1, 3/2$, para los modelos (G1, G6) y $n=5$ (G5) para el caso de nucleación-cristalización. Además cuando es decisiva la velocidad de incorporación química de los productos reaccionantes dentro de la fase que se está formando $n=3, (G3)$ y $n=4, (G4)$. Ello es válido para velocidad de nucleación constante que produce un incremento lineal de los núcleos.

Para estos modelos (G2 - G7) las $f(\alpha)$ propuestas por Šesták [1] no se corresponden con la ec. (1); pues no se cumple que [1, 3, 5, 6]:

$$\int_0^{\alpha} \frac{d\alpha}{f(\alpha)} = g(\alpha) \quad (3)$$

Es necesario entonces hallar las expresiones de $g(\alpha)$ para los modelos citados, de acuerdo con la definición (3) partiendo de las $f(\alpha)$ propuestas por [1] y comprobar su validez, para lo cual se compara la ecuación generalizada de Kissinger por dos métodos diferentes.

DESARROLLO

Para $f(\alpha) = (1-\alpha)[- \ln(1-\alpha)]^{1-1/n}$ (4) dadas en su forma general [1] tenemos

$$g(\alpha) = \int_0^{\alpha} \frac{[-\ln(1-\alpha)]^{(1/n)-1}}{1-\alpha} d\alpha$$

$$g(\alpha) = n[-\ln(1-\alpha)]^{1/n} \quad (5)$$

Para el modelo G2 por ejemplo

$$f(\alpha) = (1-\alpha)[- \ln(1-\alpha)]^{1/2}$$

e integrando se obtiene

$$g(\alpha) = 2[-\ln(1-\alpha)]^{1/2} \quad (6)$$

lo que se puede obtener también aplicando la forma general (5).

De la misma forma se comprobó que para las $f(\alpha)$ propuestas por Šesták deben corresponder las $g(\alpha)$ que se indican a continuación:

$$G3 \quad g(\alpha) = 3[-\ln(1-\alpha)]^{1/3} \quad (7)$$

$$G4 \quad g(\alpha) = 4[-\ln(1-\alpha)]^{1/4} \quad (8)$$

$$G5 \quad g(\alpha) = 5[-\ln(1-\alpha)]^{1/5} \quad (9)$$

$$G6 \quad g(\alpha) = 3/2[-\ln(1-\alpha)]^{2/3} \quad (10)$$

$$G7 \quad g(\alpha) = 5/2[-\ln(1-\alpha)]^{2/5} \quad (11)$$

Desde otro punto de vista si consideramos correctas las $g(\alpha)$ dadas en la forma (2) entonces las $f(\alpha)$ [1] no se corresponderán con estas, y teniendo en cuenta que $f(\alpha) = 1/g'(\alpha)$ deberían expresarse como:

$$f(\alpha) = n^2(1-\alpha)[- \ln(1-\alpha)]^{1-1/n} \quad (12)$$

Ejemplos

$$G2: \quad f(\alpha) = 4(1-\alpha)[- \ln(1-\alpha)]^{1/2}$$

$$G3: \quad f(\alpha) = 9(1-\alpha)[- \ln(1-\alpha)]^{2/3}$$

Al generalizar la ecuación de Kissinger por los métodos reportados por Wimmers [2] y Elder [3] se obtiene una divergencia si se utilizan las $f(\alpha)$ y $g(\alpha)$ [1] correspondientes para estos modelos cinéticos, mientras que la generalización es coincidente si se utiliza $f(\alpha)$ en la forma (4) para el método de Elder y $g(\alpha)$ en la forma (5) propuesta en este trabajo para el método de Wimmers, lo que confirma la imprecisión en el planteamiento de $g(\alpha)$ por Sesták, si no hay errores de impresión en el material [1] consultado para los modelos citados.

Elder en [3] obtiene la ecuación generalizada de Kissinger en la forma:

$$\ln \left(\beta / T_{\max}^{m+2} \right) = \ln \frac{A R}{E} - \frac{E}{RT_{\max}} + \ln \phi_m(\alpha_{\max}) \quad (13)$$

donde

$$\phi_m(\alpha_{\max}) = - \frac{f'(\alpha_{\max})}{(1 + mRT_{\max}/E)}$$

Tomemos $m=0$ de acuerdo con la consideración de Arrhenius, utilicemos $f(\alpha)$ de acuerdo con (4) y apliquemos el método a un caso concreto: velocidad de nucleación constante que produce un incremento lineal del número de núcleos para el modelo G3 (crecimiento bidimensional del núcleo).

$$f(\alpha) = (1-\alpha)[- \ln(1-\alpha)]^{2/3}$$

$$\phi_0 = [- \ln(1-\alpha_{\max})]^{2/3} - \frac{2}{3} [- \ln(1-\alpha_{\max})]^{-1/3}$$

Luego, la ecuación generalizada será,

$$\ln \left(\beta / T_{\max}^2 \right) = \ln \frac{A R}{E} - \frac{E}{RT_{\max}} + \ln \left\{ [- \ln(1-\alpha_{\max})]^{2/3} - \frac{2}{3} [- \ln(1-\alpha_{\max})]^{-1/3} \right\} \quad (14)$$

Aplicamos ahora para comparar el método de Wimmers, utilizando la función $g(\alpha)$ se propone para este modelo,

$$g(\alpha) = 3[-\ln(1-\alpha)]^{1/3} \quad (15)$$

$$S(T) = 3[-\ln(1-\alpha)]^{1/3}$$

de aquí que

$$\alpha = 1 - \exp(-(S(T)/3)^3) \quad (15-a)$$

$$d\alpha/dt = \frac{A}{\beta} \exp(-E/RT) \exp(-(S(T)/3)^3) (S(T)/3)^2 \quad (16)$$

$$\frac{d}{dT} \left(\frac{d\alpha}{dT} \right) = \frac{A}{\beta} \exp(-E/RT) \exp(-(S(T)/3)^3) \left\{ (E/RT^2) (S(T)/3)^2 - \frac{dS}{dT} \left[(S(T)/3)^4 - \frac{2}{3}(S(T)/3) \right] \right\} \quad (17)$$

$$\frac{d}{dT} \left(\frac{d\alpha}{dT} \right)_{T=T_{max}} = 0 \quad (18)$$

$$\frac{E}{RT_{max}^2} (S(T_{max})/3)^2 = \frac{A}{\beta} \exp(-E/RT_{max}) \left[(S(T_{max})/3)^4 - \frac{2}{3}(S(T_{max})/3) \right] \quad (19)$$

y de aquí, operando, se obtiene

$$\ln(\beta/T_{max}^2) = \ln(AR/E) - \frac{E}{RT_{max}} + \ln \left[(S(T_{max})/3)^2 - \frac{2}{3}(S(T_{max})/3) \right] \quad (20)$$

Si tenemos en cuenta que para T_{max} ; $\alpha = \alpha_{max}$, sustituyendo en (20) S evaluada en T_{max} según (15) obtenemos:

$$\ln(\beta/T_{max}^2) = \ln(AR/E) - \frac{E}{RT_{max}} + \ln \left\{ [-\ln(1-\alpha_{max})]^{2/3} - \frac{2}{3} [-\ln(1-\alpha_{max})]^{-1/3} \right\} \quad (21)$$

ecuación coincidente con la (14) obtenida anteriormente.

Si tomamos el modelo G4: velocidad de nucleación constante que produce un incremento lineal del número de núcleos (crecimiento tridimensional del núcleo) con

$$f(\alpha) = (1-\alpha)[- \ln(1-\alpha)]^{3/4} \quad (22)$$

se obtiene por el método de Elder la siguiente ecuación generalizada de Kissinger:

$$\ln(\beta/T_{max}^2) = \ln(AR/E) - \frac{E}{RT_{max}} + \ln \left\{ [- \ln(1-\alpha_{max})]^{3/4} - \right.$$

$$- \frac{3}{4} [-\ln(1-\alpha_{\max})]^{-1/4} \quad (23)$$

y con $g(\alpha)$ según (8) propuesta en este trabajo, se obtiene por el método de Wimmers.

$$\ln(\beta/T^2 \max) = \ln(AR/E) - \frac{E}{RT_{\max}} + \ln \left\{ \left(\frac{S(T_{\max})}{4} \right)^3 - \right. \\ \left. - (3/5(T_{\max})) \right\} \quad (24)$$

y sustituyendo $S(T_{\max}) = 4[-\ln(1-\alpha_{\max})]^{1/4}$ en esta última, obtenemos,

$$\ln(\beta/T^2 \max) = \ln(AR/E) - \frac{E}{RT_{\max}} + \ln \left\{ [-\ln(1-\alpha_{\max})]^{3/4} - \right. \\ \left. - \frac{3}{4} [-\ln(1-\alpha_{\max})]^{-1/4} \right\}$$

que coincide con la ec. (23).

De esta forma vemos que la generalización de la ecuación de Kissinger es compatible por dos métodos diferentes si a $f(\alpha)$ en la forma [1] le corresponde la expresión de $g(\alpha)$ en la forma (5) propuesta.

También se puede demostrar por medio de los métodos [2,3] que para las $g(\alpha)$ [1] es compatible la generalización si $f(\alpha)$, en el caso de los modelos de crecimiento, se expresa de la forma (12).

CONCLUSIONES

Se demuestra que para las $f(\alpha)$ propuestas por [1], en el caso de los modelos cinéticos de crecimiento del núcleo por nucleación y nucleación-cristalización deben corresponderse expresiones de la forma

$$g(\alpha) = n[-\ln(1-\alpha)]^{1/n}$$

Ejemplos

Modelo G2

$$f(\alpha) = (1-\alpha)[- \ln(1-\alpha)]^{1/2}$$

$$g(\alpha) = 2[- \ln(1-\alpha)]^{1/2}$$

Modelo G3

$$f(\alpha) = (1-\alpha)[- \ln(1-\alpha)]^{2/3}$$

$$g(\alpha) = 3[- \ln(1-\alpha)]^{1/3}$$

GLOSARIO DE SÍMBOLOS

α - grado de transformación (adimensional)

$f(\alpha)$ - expresión general del modelo cinético

$$g(\alpha) = \int_0^{\alpha} d\alpha / f(\alpha)$$

$$S(T) = \frac{A}{\beta} \int_0^{\alpha} \exp(-E/RT) dT$$

T = temperatura absoluta (K)

E = Energía de Activación (kJ/mol)

A = Factor pre-exponencial (s^{-1})

m = Exponente de la temperatura en la ecuación [3]

$$d\alpha/dt = A T^m \exp(-E/RT) f(\alpha)$$

tomado igual a cero de acuerdo a la consideración de Arrhenius

β = Velocidad de calentamiento (grados/s)

R = Constante universal de los gases

BIBLIOGRAFÍA

1. Šesták, J.

Thermophysical properties of solids. 418 Academia Praga (1984).

2. Wimmers, O.J.

Thermochim Acta. 95, 67 (1985).

3. Elder, J.P.

Analytical Calorimetry, Plenum Publishing Corporation, 255 (1984).

4. Elder, J.P.

Thermochim Acta, 95, 41 (1985).

5. Guler, C. y otros

Thermochim Acta, 54, 187 (1982).

6. Jérez, Antonio y otros

Thermochim. Acta Pre-print (1987).

Optimización de la presión parcial de oxígeno de una columna de purificación de gases

R. Bermúdez, Instituto de Materiales y Reactivos para la Electrónica, Universidad de La Habana

F. Quevedo, I. Guerasimenko y J. Arteaga, Facultad de Física, Universidad de La Habana

O. Pérez, Instituto de Materiales y Reactivos para la Electrónica, Universidad de La Habana

RESUMEN

Se reporta el régimen óptimo de trabajo de una columna de purificación de gases, capaz de establecer una presión parcial de oxígeno de $4,5 \times 10^{-6}$ atm por espacio de más de 6 horas en un flujo de Argón de 1 L/min. Para la medición del nivel de oxígeno en el gas, se construyó una celda de electrolito sólido de composición 0,85 ZrO₂ 0,15 CaO. Se reportan las condiciones óptimas de medición de dicha celda.

ABSTRACT

It is reported the optimal regime of performance in a system of gas purification, able to establish an oxygen partial pressure of $4,5 \times 10^{-6}$ atm for over 6 hours in an Argon flux of 1 L/min. A solid electrolytic cell with composition 0,85 ZrO₂ 0,15 CaO was devised in order to measure the oxygen level in the gas. The optimal conditions of measurement for this cell are reported.

INTRODUCCIÓN

En la obtención de diversos materiales en el laboratorio se presenta frecuentemente el problema de purificar y controlar los niveles de oxígeno en la atmósfera utilizada. Para ello es necesario utilizar eficientes sistemas de purificación de gases y métodos exactos de medición del grado de purificación alcanzado.

Uno de los sistemas de medición de concentración de oxígeno más sensibles y exactos, es el sistema de los electrolitos sólidos [1]. Los electrolitos sólidos son cerámicas que presentan por lo general la estructura de la Fluorita y en cuya composición se han introducido mediante el dopaje con un óxido, de menor valencia que el catión principal, vacancias de oxígeno, las cuales permiten a determinadas temperaturas medir el contenido de oxígeno de un gas por conducción aniónica. La determinación se realiza al medir la f.e.m. entre el electrodo de medición y el de referencia, situados en el interior y exterior respectivamente de la celda y se calcula según la ecuación de Nernst [2]:

$$E = \frac{RT}{4F} \ln \frac{P'_{O_2}}{P''_{O_2}}$$

donde: R constante de los gases.
 T temperatura.
 F constante de Faraday.
 E fuerza electromotriz
 P'_{O₂} presión parcial de oxígeno en el electrodo interno.
 P''_{O₂} presión parcial de oxígeno en el electrodo de referencia.

Dependiendo de la temperatura y de la P_{O₂} se presentan 3 mecanismos de conducción [1]:

1. Conductividad por iones.
2. Conductividad por electrones.
3. Conductividad por huecos.

Trabajando en condiciones óptimas se logra que para un rango amplio de temperatura la conducción por electrones y por huecos sea prácticamente nula, es decir que el número de transporte iónico t_i sea aproximadamente igual a 1.

PARTE EXPERIMENTAL

Con el objetivo de obtener Argón con un contenido mínimo de oxígeno, se construyó un sistema simple de purificación de gases por etapas. La etapa de prepurificación está constituida por un tubo de alúmina de 60 cm de longitud y 2,5 cm de diámetro, en cuya superficie exterior se enrolló una resistencia de aleación NiCr que permite obtener una temperatura máxima de calentamiento de 800 °C con una potencia de 500 Watts. Todo fue recubierto con amianto y ladrillo refractario. En el interior del tubo se colocaron alambres finos de cobre cuya superficie fue previamente purificada y activada.

Para la medición de los niveles de purificación se diseñó y construyó una celda de electrolito sólido, como se observa en la figura 1, a partir de un tubo de cerámica de composición 0,85 ZrO₂ 0,15 CaO. La f.e.m. fue

medida con un milivoltímetro digital de alta impedancia de entrada, con una sensibilidad de 0,1 mV.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Con el objetivo de comprobar el cumplimiento de la Ley de Nernst en el rango de 800-1000 °C para nuestra celda, se midió la dependencia de la f.e.m. con la temperatura, haciendo pasar a través de la celda, Argón certificado con un flujo de 1 L/min. Este flujo se mantuvo constante, incrementándose la temperatura en 20 °C cada 0,5 h. El resultado de esta medición se observa en la figura 2. Para la zona investigada es válido proponer una relación lineal entre la f.e.m. y la temperatura.

En la figura 3, se observa la dependencia de la f.e.m. con el flujo.

La relación entre la f.e.m. y la presión parcial de oxígeno fue estudiada para comprobar el cumplimiento de la ley de Nernst en el rango de 10^{-3} a 10^{-1} atm. Esta medición se realizó a una temperatura de 1000 °C y un flujo de 1 L/min, regulándose las distintas concentraciones de oxígeno de la mezcla O_2/Ar mediante un flujómetro [3]. El resultado se observa en la figura 4. De aquí se deriva la siguiente relación lineal empírica:

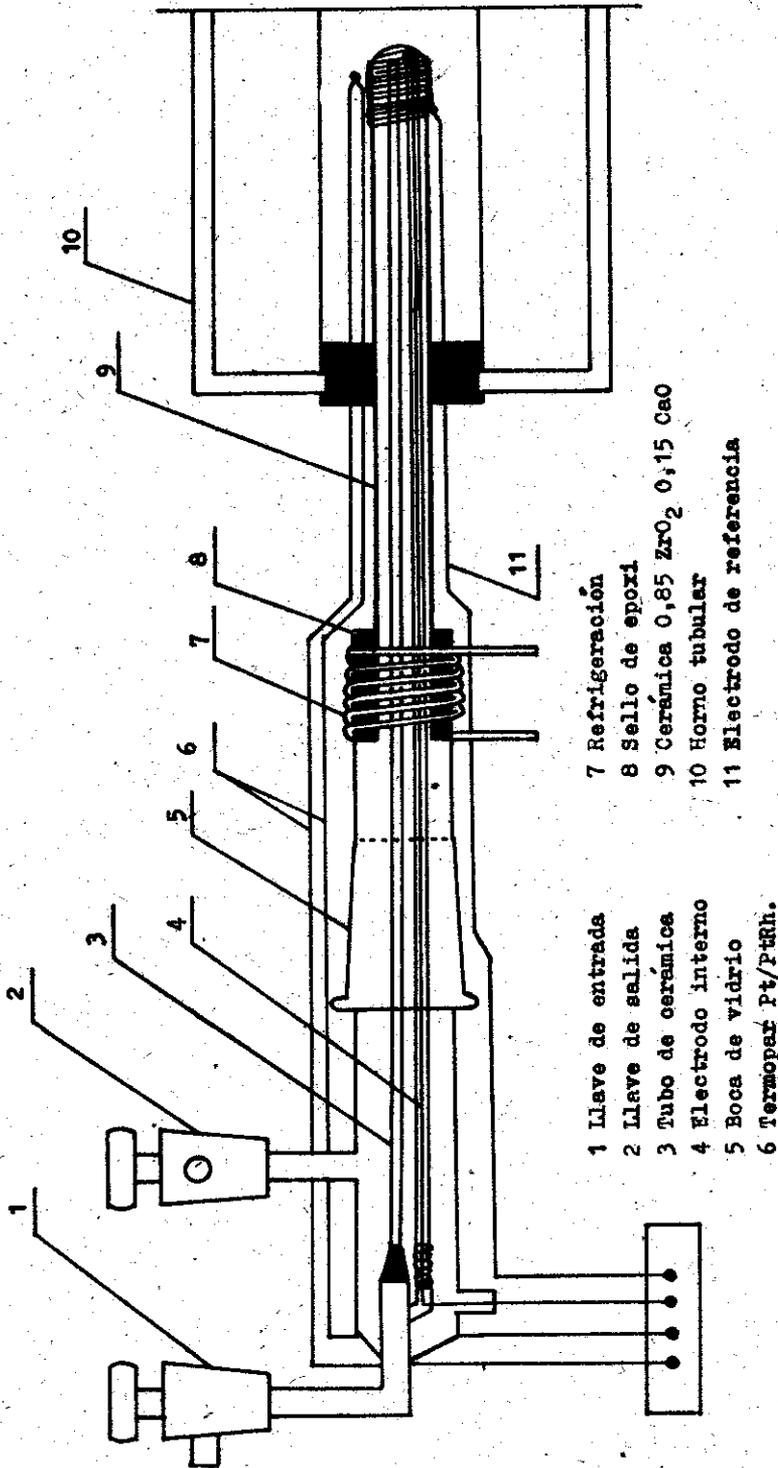
$$E = -(68,8 + 6,8) \log PO_2 - 67,7 + 10,5$$

se observa que la pendiente de la curva experimental representada por cruces coincide con la de la curva teórica, con un margen de error de un 10 %.

La presión parcial de oxígeno del Argón certificado de procedencia nacional evaluada en nuestras condiciones según la ley de Nernst es de $2,3 \times 10^{-5}$ atm. Al introducir el Argón en el sistema el nivel de oxígeno se eleva a 3×10^{-5} atm. Una vez iniciado el calentamiento de la columna, comienza a disminuir el contenido de oxígeno en el gas, alcanzando un mínimo de $4,5 \times 10^{-6}$ atm a la temperatura de 630 °C, como se observa en la figura 5. Mediante esta medición se logró comprobar que esta etapa de purificación es capaz de mantener el nivel de oxígeno en el valor anteriormente reportado por espacio de como mínimo 6 h.

CONCLUSIONES

La columna de purificación estudiada permite, a una temperatura de 630 °C, alcanzar y mantener una presión parcial de oxígeno de $4,5 \times 10^{-6}$ atm en un flujo de argón de 1 L/min por un tiempo mínimo de 6 h. Se demuestra que la celda de electrolito sólido, en las condiciones descritas en este trabajo, es capaz de realizar mediciones de la presión parcial de oxígeno en gases a un flujo de 1 L/min con un error menor al 10 %.



- 1 Llave de entrada
- 2 Llave de salida
- 3 Tubo de cerámica
- 4 Electrodo interno
- 5 Boca de vidrio
- 6 Termopar Pt/PtRh.
- 7 Refrigeración
- 8 Sello de epoxy
- 9 Cerámica $0,85 \text{ ZrO}_2 \text{ } 0,15 \text{ CaO}$
- 10 Horno tubular
- 11 Electrodo de referencia

fig.1

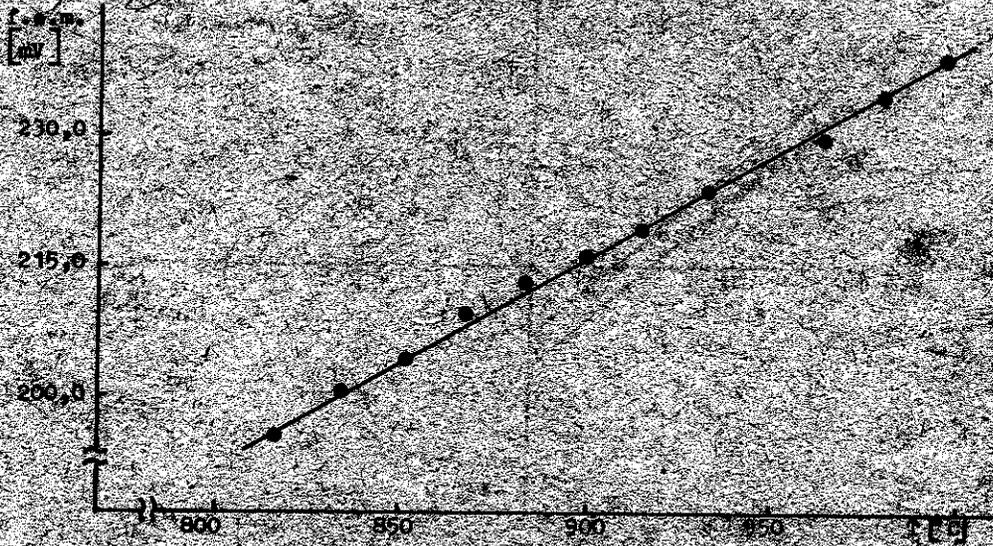


fig 2

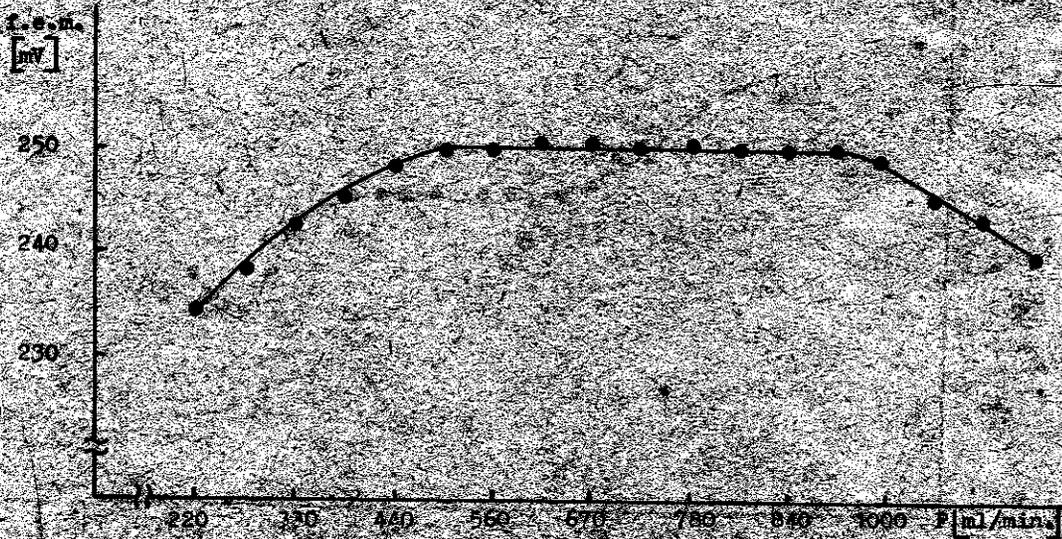


fig 3

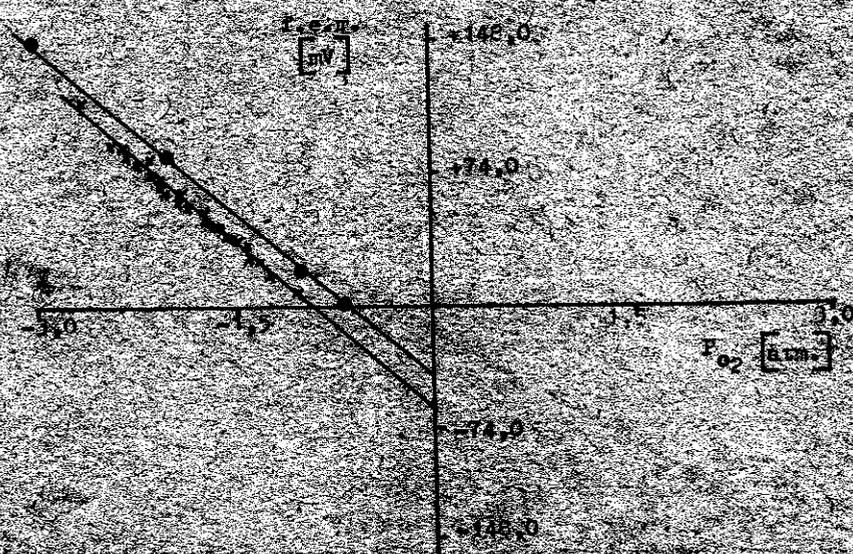


fig 4



fig 5

BIBLIOGRAFÍA

[1] Chandra, S.

Superionic Solids, principles and application North-Holland Publishing company (1981).

[2] Kiukkola, K. and C. Wagner

J. Elektrochem. Soc. (1957).

[3] Arteaga, J.

Tesis de Grado. Facultad de Física. Universidad de La Habana. (1987).

Optimización de la presión parcial de oxígeno de una columna de purificación de gases

R. Bermúdez, Instituto de Materiales y Reactivos para la Electrónica, Universidad de La Habana
F. Quevedo, I. Guerasimenko y J. Arteaga, Facultad de Física, Universidad de La Habana
O. Pérez, Instituto de Materiales y Reactivos para la Electrónica, Universidad de La Habana

RESUMEN

Se reporta el régimen óptimo de trabajo de una columna de purificación de gases, capaz de establecer una presión parcial de oxígeno de $4,5 \times 10^{-6}$ atm por espacio de más de 6 horas en un flujo de Argón de 1 L/min. Para la medición del nivel de oxígeno en el gas, se construyó una celda de electrolito sólido de composición 0,85 ZrO₂ 0,15 CaO. Se reportan las condiciones óptimas de medición de dicha celda.

ABSTRACT

It is reported the optimal regime of performance in a system of gas purification, able to establish an oxygen partial pressure of $4,5 \times 10^{-6}$ atm for over 6 hours in an Argon flux of 1 L/min. A solid electrolytic cell with composition 0,85 ZrO₂ 0,15 CaO was devised in order to measure the oxygen level in the gas. The optimal conditions of measurement for this cell are reported.

INTRODUCCIÓN

En la obtención de diversos materiales en el laboratorio se presenta frecuentemente el problema de purificar y controlar los niveles de oxígeno en la atmósfera utilizada. Para ello es necesario utilizar eficientes sistemas de purificación de gases y métodos exactos de medición del grado de purificación alcanzado.

Uno de los sistemas de medición de concentración de oxígeno más sensibles y exactos, es el sistema de los electrolitos sólidos [1]. Los electrolitos sólidos son cerámicas que presentan por lo general la estructura de la Fluorita y en cuya composición se han introducido mediante el dopaje con un óxido, de menor valencia que el catión principal, vacancias de oxígeno, las cuales permiten a determinadas temperaturas medir el contenido de oxígeno de un gas por conducción aniónica. La determinación se realiza al medir la f.e.m. entre el electrodo de medición y el de referencia, situados en el interior y exterior respectivamente de la celda y se calcula según la ecuación de Nernst [2]:

$$E = \frac{RT}{4F} \ln \frac{P'O_2}{P''O_2}$$

donde:

- R constante de los gases.
- T temperatura.
- F constante de Faraday.
- E fuerza electromotriz
- P'O₂ presión parcial de oxígeno en el electrodo interno.
- P''O₂ presión parcial de oxígeno en el electrodo de referencia.

Dependiendo de la temperatura y de la P_{O₂}, se presentan 3 mecanismos de conducción [1]:

1. Conductividad por iones.
2. Conductividad por electrones.
3. Conductividad por huecos.

Trabajando en condiciones óptimas se logra que para un rango amplio de temperatura la conducción por electrones y por huecos sea prácticamente nula, es decir que el número de transporte iónico t_1 sea aproximadamente igual a 1.

PARTE EXPERIMENTAL

Con el objetivo de obtener Argón con un contenido mínimo de oxígeno, se construyó un sistema simple de purificación de gases por etapas. La etapa de prepurificación está constituida por un tubo de alúmina de 60 cm de longitud y 2,5 cm de diámetro, en cuya superficie exterior se enrolló una resistencia de aleación NiCr que permite obtener una temperatura máxima de calentamiento de 800 °C con una potencia de 500 Watts. Todo fue recubierto con amianto y ladrillo refractario. En el interior del tubo se colocaron alambres finos de cobre cuya superficie fue previamente purificada y activada.

Para la medición de los niveles de purificación se diseñó y construyó una celda de electrolito sólido, como se observa en la figura 1, a partir de un tubo de cerámica de composición 0,85 ZrO₂ 0,15 CaO. La f.e.m. fue

medida con un milivoltmetro digital de alta impedancia de entrada, con una sensibilidad de 0,1 mV.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Con el objetivo de comprobar el cumplimiento de la Ley de Nernst en el rango de 800-1000 °C para nuestra celda, se midió la dependencia de la f.e.m. con la temperatura, haciendo pasar a través de la celda, Argón certificado con un flujo de 1 L/min. Este flujo se mantuvo constante, incrementándose la temperatura en 20 °C cada 0,5 h. El resultado de esta medición se observa en la figura 2. Para la zona investigada es válido proponer una relación lineal entre la f.e.m. y la temperatura.

En la figura 3, se observa la dependencia de la f.e.m. con el flujo.

La relación entre la f.e.m. y la presión parcial de oxígeno fue estudiada para comprobar el cumplimiento de la ley de Nernst en el rango de 10^{-3} a 10^{-1} atm. Esta medición se realizó a una temperatura de 1000 °C y un flujo de 1 L/min, regulándose las distintas concentraciones de oxígeno de la mezcla O_2/Ar mediante un flujómetro [3]. El resultado se observa en la figura 4. De aquí se deriva la siguiente relación lineal empírica:

$$E = -(68,8 + 6,8) \log PO_2 - 67,7 + 10,5$$

se observa que la pendiente de la curva experimental representada por cruces coincide con la de la curva teórica, con un margen de error de un 10 %.

La presión parcial de oxígeno del Argón certificado de procedencia nacional evaluada en nuestras condiciones según la ley de Nernst es de $2,3 \times 10^{-5}$ atm. Al introducir el Argón en el sistema el nivel de oxígeno se eleva a 3×10^{-5} atm. Una vez iniciado el calentamiento de la columna, comienza a disminuir el contenido de oxígeno en el gas, alcanzando un mínimo de $4,5 \times 10^{-6}$ atm a la temperatura de 630 °C, como se observa en la figura 5. Mediante esta medición se logró comprobar que esta etapa de purificación es capaz de mantener el nivel de oxígeno en el valor anteriormente reportado por espacio de como mínimo 6 h.

CONCLUSIONES

La columna de purificación estudiada permite, a una temperatura de 630 °C, alcanzar y mantener una presión parcial de oxígeno de $4,5 \times 10^{-6}$ atm en un flujo de argón de 1 L/min por un tiempo mínimo de 6 h. Se demuestra que la celda de electrolito sólido, en las condiciones descritas en este trabajo, es capaz de realizar mediciones de la presión parcial de oxígeno en gases a un flujo de 1 L/min con un error menor al 10 %.

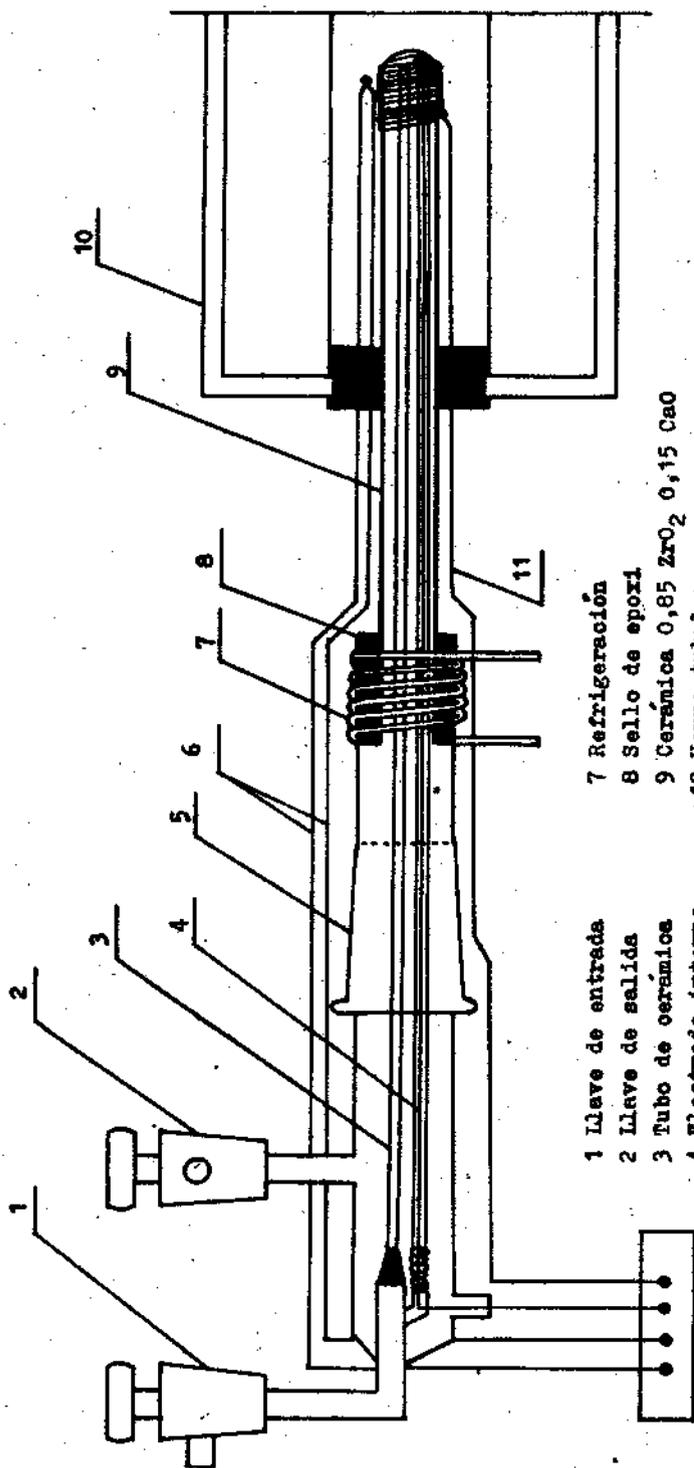


fig.1

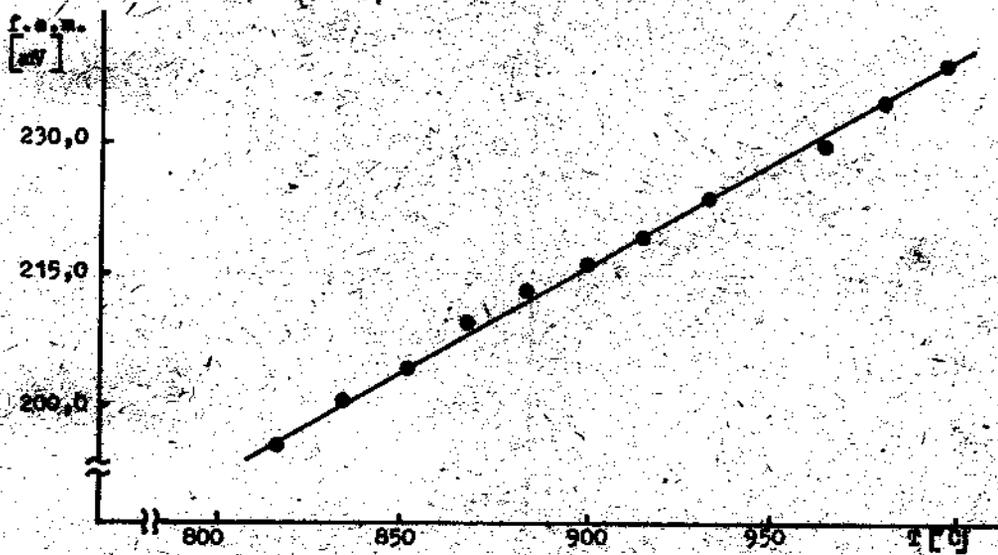


fig. 2

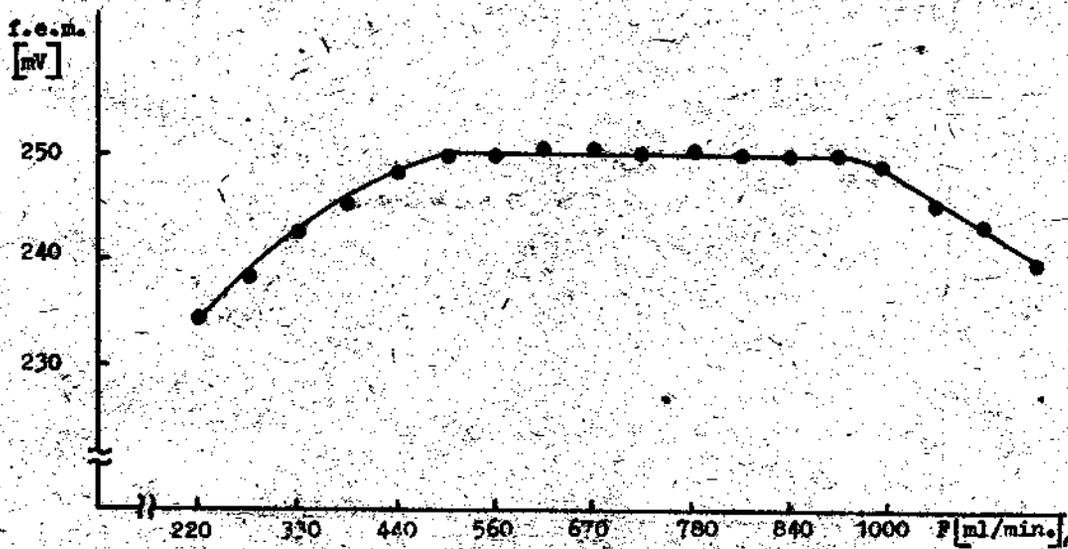


fig. 3

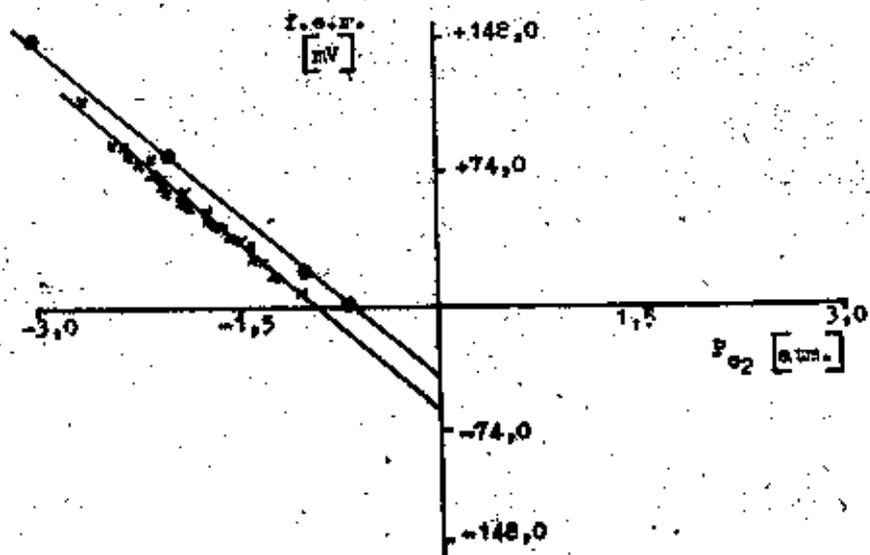


fig. 4

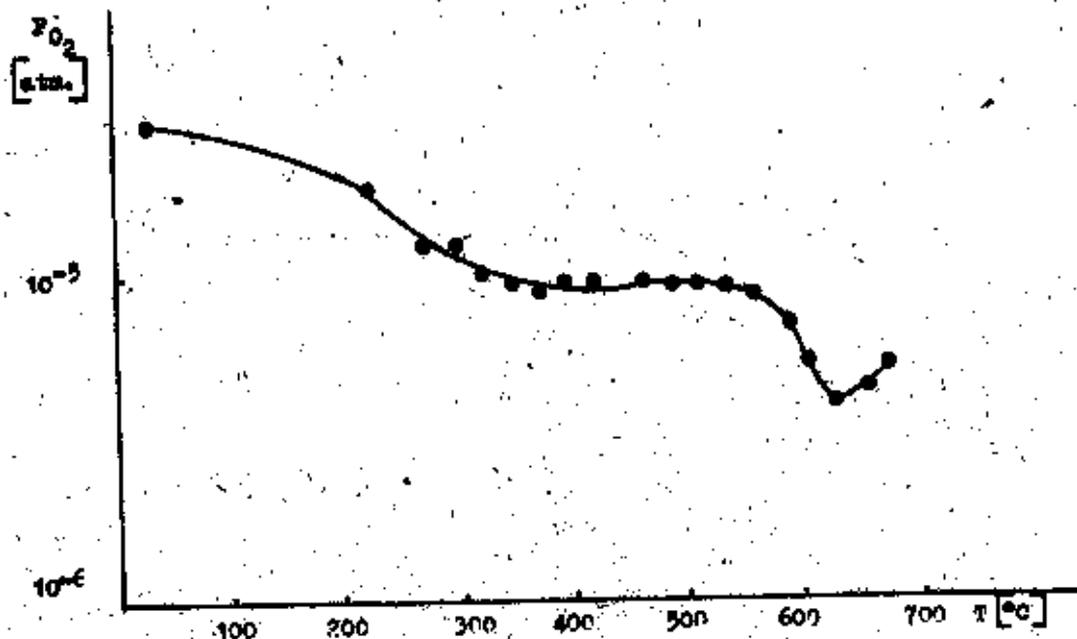


fig. 5

- [1] Chandra, S.
Superionic Solids, principles and application North-Holland
Publishing company (1981).
- [2] Kikkola, K. and C. Wagner
J. Elektrochem. Soc. (1957).
- [3] Arteaga, J.
Tesis de Grado. Facultad de Física. Universidad de La Habana. (1987).

La masa efectiva en un problema 1D periódico de Schrodinger en la aproximación cuasiclásica

H. Rodríguez Coppola y R. Pérez Alvarez
Departamento de Física Teórica, Universidad de La Habana

RESUMEN

Se deriva la masa efectiva de un electrón moviéndose en un potencial unidimensional periódico en la aproximación cuasiclásica con masa constante y masa dependiente de la posición y se obtiene coincidencia con la expresión obtenida en un análisis clásico.

ABSTRACT

The effective mass of an electron moving in a one-dimensional periodical potential is obtained in the quasiclassical approximation with constant and position-dependent mass. The obtained expression is coincident with the one obtained in a classical analysis.

1. INTRODUCCIÓN

La masa efectiva es un concepto básico de la Física del Estado Sólido. Este concepto surge en el análisis del movimiento de los electrones en el sólido cuando, hecha la aproximación de una banda [1], se sustituye el potencial de la red cristalina y el electrón que se mueve, por una nueva *partícula libre* que tiene un movimiento con parámetros similares a los del electrón en el sólido sometido al potencial cristalino.

La masa efectiva se deriva en forma sencilla empleando diferentes modelos simples como los de electrón, cuasi-libre, electrón cuasi-ligado y otros (Ver por ejemplo [2,3]). Tal parece que dicho concepto correspondería a una característica mecano-cuántica de la descripción de los electrones en

el sólido, sin embargo recientemente [4] se comprobó, tanto matemáticamente como mediante una demostración experimental docente, que el concepto de masa efectiva se puede introducir en un marco clásico, pues realmente corresponde a cierto promedio del movimiento del electrón para considerarlo como *partícula libre* en el sólido.

Este hecho nos motivó el estudio de la masa efectiva en la aproximación cuasiclásica de un potencial periódico arbitrario unidimensional.

En este trabajo presentamos la derivación cuasiclásica de la masa efectiva de un electrón moviéndose en un potencial periódico y su generalización cuando nos encontramos con una masa dependiente de la posición, como es el caso de materiales no homogéneos [5-6], para los cuales se ha derivado una ecuación para el movimiento del electrón en una banda suficientemente aislada que corresponde a una de Schrödinger unidimensional estacionaria con masa dependiente de la posición.

2. MASA EFECTIVA EN LA APROXIMACIÓN CUASICLÁSICA

Consideremos un problema periódico como el de la figura donde suponemos que el potencial tiene un comportamiento suave (sin saltos) en la celda unitaria, al igual que la masa.

Es conocido [7] que la relación de dispersión que determina la ley de variación de la energía con el cuasivector de onda del problema periódico, empleando el método de la matriz de transferencia (TM) para el cálculo es:

$$\cos qd = (1/2) \text{Sp}\{M(x+d, x)\} \quad (1)$$

donde la celda unitaria tiene longitud d y $M(x+d, x)$ es la matrix 2×2 que transfiere la función de onda y su derivada de un punto cualquiera (x) de la celda unitaria hasta aquel ($x+d$) donde se repite la forma de la celda elemental.

En la aproximación cuasiclásica la TM correspondiente a una celda unitaria con potencial y masa de comportamiento suave y arbitrario, cuando $E > \max\{V_-(x)\}$ es [8]:

$$M(x+d, d) = \begin{bmatrix} y_{11} \cos(K(x+d, x)) & y_{12} \sin(K(x+d, x)) \\ -y_{21} \sin(K(x+d, x)) & y_{22} \cos(K(x+d, x)) \end{bmatrix} \quad (2)$$

donde se ha empleado la siguiente notación:

$$K(x+d, x) = \int_x^{x+d} |k(z)| dz \quad (3)$$

$$k(x) = \sqrt{\frac{2m(x)}{\hbar^2} (E - V_e(x))} \quad (4)$$

$$V_e(x) = V(x) + \hbar^2 k_t^2 / 2m(x) \quad k_t^2 = k_x^2 + k_y^2 \quad (5)$$

$$y_{11}(c_2, c_1) = \sqrt{\left| \frac{k(c_1)m(c_2)}{k(c_2)m(c_1)} \right|} \quad y_{22}(c_2, c_1) = \sqrt{\left| \frac{k(c_2)m(c_2)}{k(c_1)m(c_1)} \right|} \quad (6)$$

$$y_{12}(c_2, c_1) = \sqrt{\left| \frac{m(c_2)}{m(c_1)k(c_2)k(c_1)} \right|} \quad y_{21}(c_2, c_1) = \sqrt{\left| \frac{m(c_2)k(c_2)k(c_1)}{m(c_1)} \right|}$$

En (6) c_2 y c_1 son cualquier par de puntos. Al aplicar (6) en (2) c_1 y c_2 son los puntos x y $x+d$ respectivamente.

Empleando (2) en (1) se tiene:

$$qd = K(x+d, x) + 2n\pi, \quad \text{si } n=0, 1, 2, \dots \quad (7)$$

La masa efectiva se define como [1]:

$$m^* = \frac{\hbar^2}{E''(q)} \quad (8)$$

donde las primas indican aquí derivación respecto de q .

Necesitamos entonces hallar $E''(q)$. Para ello, derivamos dos veces la relación (7). Después de algunos pasos algebraicos más, la relación (8) puede escribirse como:

$$m^* = - \frac{\hbar^2}{d^2} \frac{\left[\int_x^{x+d} \frac{dk(x)}{dE} dx \right]^3}{\int_x^{x+d} \frac{d^2k(x)}{dE^2} dx} \quad (9)$$

Empleando ahora la definición (4) y la notación:

$\langle \dots \rangle = \frac{1}{d} \int_x^{x+d} \dots dx$, que indica promedio en la celda unitaria, se expresa (9) en la forma:

$$m^* = \frac{\left[\left\langle \frac{m(x)}{E - V_e(x)} \right\rangle \right]^3}{\left[\left\langle \frac{m(x)}{(E - V_e(x))^3} \right\rangle \right]} \quad (10)$$

ecuación igual a la obtenida clásicamente [3] cuando se hace m constante.

Cuando el potencial y la masa tienen puntos de salto en el interior de la celda unitaria la expresión (10) se modifica, y se obtiene:

$$m^* = \frac{(A_1 c_1 - B_1 s_1) \hbar^2}{d^2 DF} \quad (11)$$

$$F = c_1 [\Gamma B_1^2 - A_2] + s_1 [2A_1 B_1 + \Gamma B_2] - (\Gamma c_1 / D) [A_1^2 c_1^2 - 2A_1 B_1 c_1 s_1 + \Gamma^2 A_1^2 s_1^2]$$

$$\text{siendo } D = 1 - \Gamma^2 c_1; \quad A_1 = d\Gamma/dE; \quad B_1 = dK_1/dE; \quad A_2 = d^2\Gamma/dE^2;$$

$$B_2 = d^2K_1/dE^2; \quad c_1 = \cos K_1; \quad s_1 = \sin K_1; \quad \Gamma = (1/2)(\gamma_a + 1/\gamma_a);$$

y $\gamma_a = [m(a-)k(a+)/m(a+)k(a-)]^{1/2}$; si a es el punto de salto de la masa. La ecuación (11) se reduce a la (10) si $\Gamma = 1$. Aquí $K_1 = K(x+d, x)$.

3. CONCLUSIONES

Como puede verse, se ha obtenido la masa efectiva de un electrón en un movimiento periódico arbitrario empleando la aproximación cuasiclásica incluyendo la posibilidad de masa variable. Este cálculo, que resulta sencillo, puede utilizarse en la asignatura Física del Estado Sólido cuando se introduzca en ella el estudio de los nuevos sistemas hechos por el hombre como pozos cuánticos y superredes, que constituyen una de las direcciones de trabajo de la microelectrónica en el presente.

Es de notar que cuando la masa es constante, el resultado cuasiclásico coincide con el clásico obtenido en [4]. Sería interesante estudiar la Mecánica Clásica de los sistemas de masa variable para ver si tal coincidencia persiste.

Físicamente aquí hay una interpretación clara. La masa efectiva viene determinada, para una energía dada, como el promedio en la celda unitaria de una relación con el potencial que experimenta el electrón y resulta factible entonces, después de este promedio, sustituir el conjunto electrón-potencial periódico, por una *partícula libre* cuyo comportamiento reproduce el del sistema.

Como se ve, además, cuando hay un punto de salto en el interior de la celda unitaria la expresión obtenida es más compleja.

El análisis hecho es válido para $E > \max\{V_e(x)\}$. Si F es tal que hay dos puntos de retorno clásicos en cada celda unitaria, la relación de dispersión es un tanto más compleja que (7), i.e., $\cos qd = 2 \operatorname{Re}\{p e^{ik(x+d, x)}\}$ [7], siendo aquí p un parámetro que depende de la forma específica del potencial y la masa γ que sirve para escribir la matriz de transferencia. La masa efectiva que de ella se deduce se aparta del resultado clásico.

BIBLIOGRAFÍA

[1] Bassani, F.

Electronic States and Optical Transitions in Solids. (Pergamon Press) Oxford 1975.

[2] Kittel, Ch.

Introduction to Solid State Physics. 4ta. Ed. (Edición R) Cuba, 1971.

- [3] Kiriliev, P.S.
Semiconductor Physics Chap. II Mir Publishers (1974).
- [4] Nawrocki, M. y J.A. Gaj
Am. J. Phys. 52, 807 (1984).
- [5] Morrow, R.A. y K.R. Brownstein
Phys. Rev. B 30, 678 (1984).
- [6] Milanovic, V. y D. Tjanić
Phys. Stat. Sol. (b) 110, 687 (1984).
- [7] Pérez Álvarez, R. y B. Rodríguez Coppola
Enviado a Phys. Stat. Sol. (b) sobre la TM en problemas
1D-Schrödinger.
- [8] Pérez Álvarez, R.; B. Rodríguez Coppola; J. López Gondar y
M. Lago Izquierdo
Enviado a Phys. Stat. Sol. (b) sobre TM en la aproximación cuasi-
clásica.

The quasiclassical approximation for problems with position dependent mass. The transfer matrix method.

H. Rodríguez Coppola and R. Pérez Álvarez
Departamento de Física Teórica, Facultad de Física, Universidad de La Habana

ABSTRACT

We present the quasiclassical approximation for the 1D-Schrödinger equation with position-dependent mass describing nonhomogeneous semiconductor materials. We develop the transfer matrix method for this approximation and we report the formulae for the solution of five standard problems in quantum mechanics: levels in a well, transmission coefficient of a barrier, quasistationary levels of a well open by one and the two sides and the dispersion relation of a periodical problem. In particular we treat the case when mass and potential have points of finite jump which may be classical turning points.

RESUMEN

Se presenta la aproximación cuasiclásica para los problemas 1D-Schrödinger con masa dependiente de la posición planteados para describir materiales semiconductores inhomogéneos. Se desarrolla el método de la matriz de transferencia para esta aproximación y se reportan fórmulas para las soluciones de cinco problemas importantes de la mecánica cuántica: niveles de un pozo, coeficiente de transmisión de una barrera, niveles cuasiestacionarios de un pozo abierto por uno y ambos extremos y relación de dispersión de un problema periódico. Se trata, en particular, el caso cuando la masa y el potencial tienen puntos de salto finito que pueden ser puntos de retorno clásicos.

1. INTRODUCTION

The 1D problems are one of the most studied in quantum mechanics because of their simplicity and their wide application. The quasiclassical approximation to this kind of problems have provided succes in explaining cualitative aspects of different physical systems. In recent years, with the development of man-made structures as quantum wells and superlattices those fields have been re-examined in many aspects.

In the effective mass approximation, an isolated enough band can be described by a 1D-Schrödinger equation with constant mass [1-2] if the material is homogeneous and with position dependent mass [3-4] if non-homogeneous.

In the present paper we develop the quasiclassical approximation for the 1D-Schrödinger equation with constant and position-dependent mass. Also applying the transfer matrix (TM) method [5] used by the authors for solving this type of problems and [6] specially for the quasiclassical approximation, we study five of the main problems in quantum mechanics; the energy levels of a well, the transmission coefficient of a barrier, the quasistationary levels of a well open by one and the two sides and the dispersion relation of a periodical problem. In particular we emphasize in the case when the mass has points of jump of finite height which may be classical turning points. All these problems are directly related to the study of the energy spectrum, optical and transport properties of layered structures which now can be analized within this approximation.

For completeness, in section 2 we breifly present the quasiclassical approximation for 1D-Schrödinger equation with position-dependent mass; in section 3 we give the main aspects of the TM method particularizing for the case in which the mass has points of jump of finite height. Section 4 is devoted to give the resulting formulae for the above mentioned five problems and to show how some of them become when applying to already known potential profiles in the case of constant mass. Finally we give some conclusions.

2. THE QUASICLASSICAL APPROXIMATION FOR THE 1D-SCHRÖDINGER EQUATION WITH POSITION-DEPENDENT MASS

In [7] the one band Hamiltonians derived in the effective mass theory for nonhomogeneous systems are summed up in the class:

$$A = \frac{1}{4} \left\{ m^a(x) \hat{p}_m^b(x) \hat{p}_m^c(x) + m^c(x) \hat{p}_m^b(x) \hat{p}_m^a(x) \right\} + V(x) \quad (1)$$

with $a+b+c = -1$. In [8] some of the Hamiltonians included in (1) are refused because of difficulties with the solution of already known problems. We shall consider here the case with $a=c=0$ and $b=-1$ as the most widely applied.

In separating variables we obtain the 1D equation of motion with an effective potential given by:

$$V_e(x) = V(x) + \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m(x)} ; \quad k_1^2 = k_y^2 + k_z^2 \quad (2)$$

where $V(x)$ is the original potential considered in the problem.

To solve the equation quasiclassically we follow [9] and considering contributions up to first-order in \hbar we obtain for the solution the expression:

$$F(x) = \sqrt{\frac{m(x)}{k(x)}} \left[A_e^{ik(x,a)} + B_e^{-ik(x,a)} \right] \quad (3)$$

where we use the notation

$$K(c_2, c_1) = \int_{c_1}^{c_2} |k(x)| dx \quad (4)$$

$$k^2(x) = -\kappa^2(x) = 2m(x)\{E - V_e(x)\}/\hbar^2 \quad (5)$$

which we shall use throughout the paper. In (4) c_1 and c_2 are any arbitrary points. In (3) "a" in $K(x,a)$ is any fixed point.

Demanding the first-order term in \hbar to be smaller than the zeroth-order term in the power series of the action of the system we obtain the applicability condition for the approximation which is:

$$\left| \frac{1}{m(x)} \frac{d}{dx} \left[\frac{m(x)\lambda(x)}{2} \right] \right| \ll 1 \quad (6)$$

where

$$\lambda(x) = (2\pi)/k(x) \quad (7)$$

Equation (6) reduces to the usually obtained [9] by making $m(x) = \text{constant}$.

To obtain the connection rules for the wave function around a turning point assuming well behaved potential profile and mass distribution, we have to solve the equation for $F(x)$ in the neighborhood of the turning point $x=d$. Taking the linear approximation for the square of the quasi-wave vector given in (5) it can be shown that the equation obtained can be reduced to an Airy's [10] one. This gives the same connection rules already known, valid for the constant mass problems, provided that the potential profile and mass distribution are slowly varying functions in the neighborhood of the turning point $x=d$, and the condition:

$$\left| \frac{1}{m(d)} \left[\frac{m'(d)}{m(d)} \right]^3 \right| < \left| \frac{V_e'(d)}{\hbar^2} \right| \quad (8)$$

to be satisfied. This condition is obtained in demanding that the interval corresponding to the Airy functions around $x=d$ overlaps the regions where the quasiclassical solutions are valid.

There are other cases of interest among which we have: a) The potential and mass functions have a jump of finite height in a turning point; b) the potential has a jump of finite height in a turning point and the mass is continuous at it (specially here we include the case $m = \text{cte.}$) and c) the potential profile and mass distribution have a jump of finite height at a point which is not a turning point. In all these cases the corresponding quasiclassical solutions are valid up to this point at each side of it and there is unnecessary approximate connection rules. But you have to demand continuity of the current density in crossing this point. This lead us to satisfy the conditions:

$$F(d-) = F(d+) \quad (9)$$

$$\frac{1}{m(d-)} F'(d-) = \frac{1}{m(d+)} F'(d+)$$

(9) will introduce some differences in the corresponding TM as will be seen in the next section.

3. TM FORMALISM FOR THE QUASICLASSICAL SOLUTION

Knowing the form of the solution in a region, it can be constructed the TM by forming a canonical basis [5 and reference 2 therein], for $x=x_0$, and with it the TM.

In [6] we give the results obtained in the case of well behaved mass and potential functions when the points x and x_0 (in between which we make the transferring) lay in the same classically allowed region. We shall use the following notation in further formulae, as done in [6]:

$$y_{11}(c_2, c_1) = \sqrt{\left| \frac{k(c_1)m(c_2)}{k(c_2)m(c_1)} \right|} \quad y_{22}(c_2, c_1) = \sqrt{\left| \frac{k(c_2)m(c_2)}{k(c_1)m(c_1)} \right|} \quad (10)$$

$$y_{12}(c_2, c_1) = \sqrt{\left| \frac{m(c_2)}{m(c_1)k(c_2)k(c_1)} \right|} \quad y_{21}(c_2, c_1) = \sqrt{\left| \frac{m(c_2)k(c_2)k(c_1)}{m(c_1)} \right|}$$

here c_2 and c_1 are any arbitrary points.

We report here the matrix elements of the TM corresponding to x and x_0 in the same classically allowed region when there is a point $x=x_r$ where the mass has a jump of finite height in between them. In $x=x_r$ we must satisfy conditions (9), which in matrix form are written as:

$$C(x_r) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \frac{m(x_r+)}{m(x_r-)} \end{bmatrix} \quad (11)$$

Then the TM considered is:

$$M(x, x_0) = M(x, x_r) C(x_r) M(x_r, x_0)$$

where the matrix elements are:

$$\begin{aligned} M_{11}(x, x_0) &= Y_{11}(x, x_0) \{ \gamma(x_r) c_1 \cos_1 - (1/\gamma(x_r)) s_1 \sin_1 \} \\ M_{12}(x, x_0) &= Y_{12}(x, x_0) \{ \gamma(x_r) s_1 \cos_1 + (1/\gamma(x_r)) c_1 \sin_1 \} \\ M_{21}(x, x_0) &= Y_{21}(x, x_0) \{ \gamma(x_r) c_1 \sin_1 - (1/\gamma(x_r)) s_1 \cos_1 \} \\ M_{22}(x, x_0) &= Y_{22}(x, x_0) \{ \gamma(x_r) s_1 \sin_1 + (1/\gamma(x_r)) c_1 \cos_1 \} \end{aligned} \quad (12)$$

where:

$$\gamma(x_r) = \left[\frac{-m(x_{r-})k(x_{r-})}{-m(x_{r+})k(x_{r+})} \right]^{\frac{1}{2}}$$

$c_1 = \cos(K(x_r, x_0))$; $s_1 = \sin(K(x_r, x_0))$; $\cos_1 = \cos(K(x, x_r))$ and $\sin_1 = \sin(K(x, x_r))$

When one makes $m(x_r+) = m(x_r-)$, then (12) reduces to the TM reported in [6].

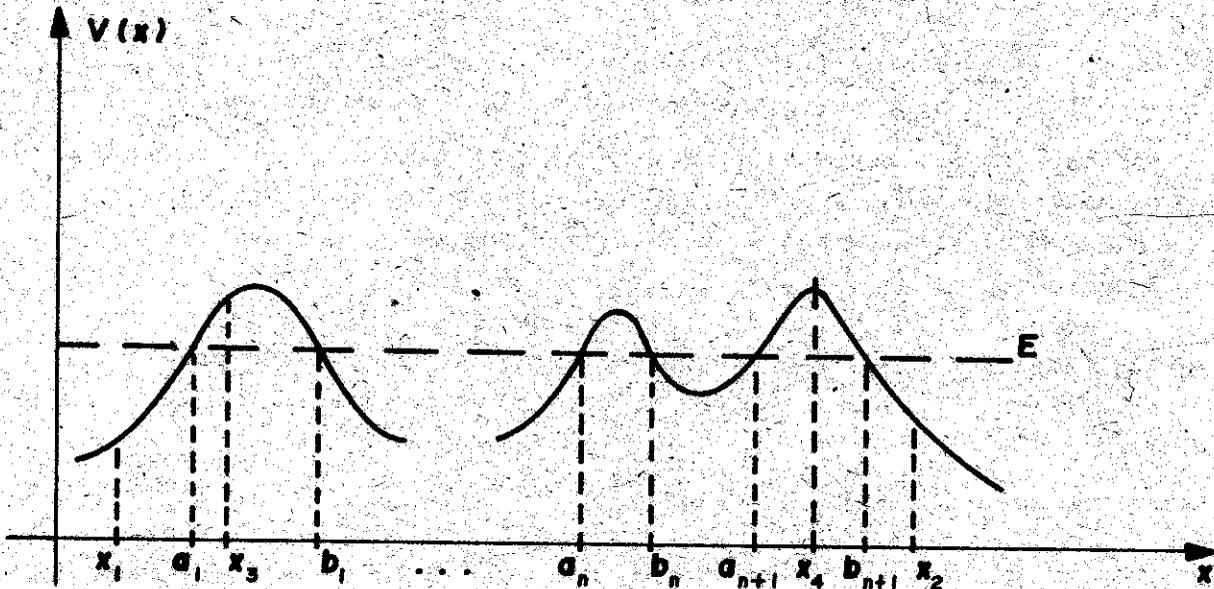


Figure 1. Model of potential (well behaved case) considered in the article, a and b, are turning points and x, are intermediate points

By direct multiplication it can be shown that in any of the cases we have considered, the TM corresponding to transfer from the points depicted in figura 1 can be written as:

$$M_{ij}(x_2, x_1) = y_{ij} \left\{ p \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ i & 1 \end{pmatrix} e^{i(K_2+K_1)} + q \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix} e^{-i(K_2-K_1)} + c.c. \right\}_{ij} \quad (13)$$

$$M_{ij}(x_4, x_3) = y_{ij} \left\{ w \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ i & 1 \end{pmatrix} e^{K_4+K_3} + u \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} e^{(K_4-K_3)} + v \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix} e^{-(K_4-K_3)} + t \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & i \end{pmatrix} e^{-(K_4+K_3)} \right\}_{ij} \quad (14)$$

$$M_{ij}(x_4, x_1) = y_{ij} \left\{ d \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & i \end{pmatrix} e^{(-K_4+iK_1)} + f \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} e^{(K_4+iK_1)} + c.c. \right\}_{ij} \quad (15)$$

and

$$K_2 = K(x_2, b_{N+1}); \quad K_1 = K(a_1, x_1); \quad K_3 = K(b_1, x_3); \quad K_4 = K(x_4, a_{N+1}) \quad (16)$$

Here y_{ij} are given by (10) and evaluated at the same arguments than M_{ij} where $i, j=1, 2$ and c.c. means the corresponding complex conjugate terms.

These expressions represent the general form of the TM in terms of a few parameters (p and q when transferring between points in classically allowed regions; t, u, v and w when transferring between classically forbidden regions and d, f when transferring between points at different kind of regions) which obviously will change in each case. The central point of these forms are the separation attained between the properties of the barrier or well and the variable extreme intervals ((x_1, a_1) , for example).

Also we have the following relations:

$$4\{|p|^2 - |q|^2\} = 1 \quad (17a)$$

$$4\{tw - uv\} = 1 \quad (17b)$$

$$4i\{df^* - df\} = 1 \quad (17c)$$

which assures the property $\det\{M(c_2, c_1)\} = (m(c_2)/m(c_1)) [11]$.

In [6] we report the relations between the parameters p, q, t, u, v, w, d and f (valid for the cases of well behaved potential and mass [6] and the ones treated here). Also we give there the recurrence relations for these parameters which permit to obtain their form for any number of barriers (wells) in terms of the corresponding parameters of one barrier (well), not given here for brevity.

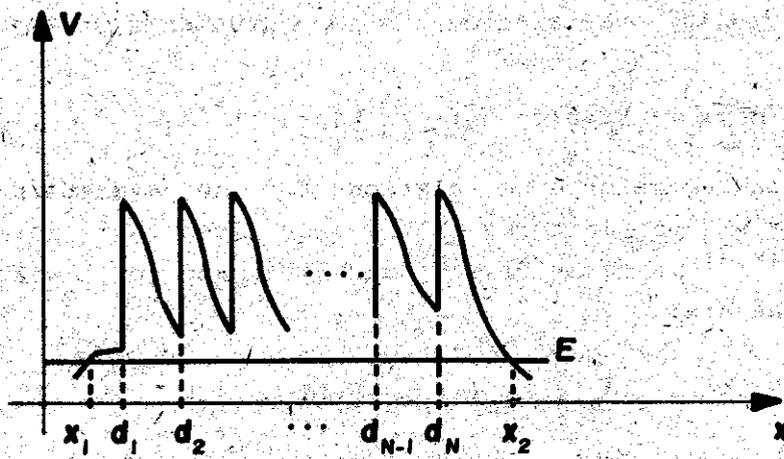
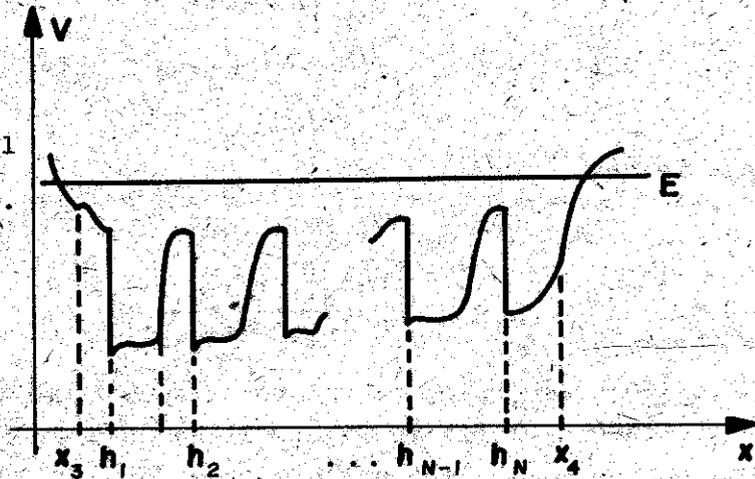


Figure 2. Model of potential with points of jump of finite height (barrier case). d_j are the point of jump. E is the energy considered

Figure 3. Model of potential with points of jump of finite height (well case). h_j are the points of jump. E is the energy considered



In addition, when the mass or potential have points of jump of finite height, one may have situations like the ones depicted in figures 2 and 3. By complete induction procedure it can be proved that the TM in these cases can be written as:

$$M_{ij}(x_2, x_1) = Y_{ij} \left\{ \alpha \begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & 1 \end{pmatrix} e^{i(K_a + K_b)} + \beta \begin{pmatrix} 1 & i \\ i & -1 \end{pmatrix} e^{i(K_a - K_b)} + \text{c.c.} \right\}_{ij} \quad (18)$$

$$M_{ij}(x_4, x_3) = Y_{ij} \left\{ \theta \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} e^{K_c + K_d} + \omega \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} e^{(K_c - K_d)} + \lambda \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix} e^{-(K_c - K_d)} + \mu \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} e^{-(K_c + K_d)} \right\}_{ij} \quad (19)$$

where the y_{ij} 's are given by (10) evaluated at the same arguments of the M_{ij} and:

$$K_a = K(x_2, d_N); K_b = K(d_1, x_1); K_c = K(x_4, h_N); K_d = K(h_1, x_3)$$

Also it is easy to obtain the recurrence relations for the parameters corresponding to $N+1$ points of jump in terms of the ones given for N points of jump (i.e. $\alpha^{(N+1)}$ and $\beta^{(N+1)}$ in terms of $\alpha^{(N)}$ and $\beta^{(N)}$, and so on with the others). The expressions are:

$$\begin{aligned} \alpha^{(N+1)} &= A_1 \alpha^{(N)} e^{ik(d_{N+1}, d_N)} + B_1 (\beta^{(N)}) * e^{-ik(d_{N+1}, d_N)} \\ \beta^{(N+1)} &= A_1 \beta^{(N)} e^{ik(d_{N+1}, d_N)} + B_1 (\alpha^{(N)}) * e^{-ik(d_{N+1}, d_N)} \\ \theta^{(N+1)} &= A_1 \theta^{(N)} e^{k(h_{N+1}, h_N)} + B_1 \lambda^{(N)} e^{-k(h_{N+1}, h_N)} \\ \Omega^{(N+1)} &= A_1 \Omega^{(N)} e^{k(h_{N+1}, h_N)} + B_1 \mu^{(N)} e^{-k(h_{N+1}, h_N)} \\ \lambda^{(N+1)} &= A_1 \theta^{(N)} e^{k(h_{N+1}, h_N)} + B_1 \lambda^{(N)} e^{-k(h_{N+1}, h_N)} \\ \mu^{(N+1)} &= B_1 \Omega^{(N)} e^{k(h_{N+1}, h_N)} + A_1 \mu^{(N)} e^{-k(h_{N+1}, h_N)} \end{aligned} \quad (20)$$

here we have named:

$$A_1 = (1/2)[q + (1/q)]; \quad B_1 = (1/2)[q - (1/q)]$$

$$q = \left| \frac{m(l_{N+1}^-)k(l_{N+1}^+)}{m(l_{N+1}^+)k(l_{N+1}^-)} \right|^{1/2}$$

where $l=d, h$ according to the formula considered, and we use modulus because in the case depicted in figure 2 the quasiwave vectors are imaginary. Notice that in the integrals of the form (4) the limits are from the last point of jump to the one added in each case.

We remark that in (20) we explicitly declared the number of points of jump we are dealing with, but in (18) and (19) we omit it and these expressions are general for any points of jump.

In particular, for the case of one point of jump we have:

$$\alpha = q + (1/q) \quad \beta = q - (1/q) \quad (21)$$

$$\theta = \mu = q + (1/q) \quad \Omega = \lambda = q - (1/q) \quad (22)$$

We omit, in order to make this paper not too long, the results of parameters p and q when we have a barrier and w, u, v and t when a well with one turning point of jump and for well behaved potential and mass (the last one already reported in [6]), but they are easily obtainable by matrix multiplication.

4. FORMULAE FOR THE STANDARD PROBLEMS.

Having the general form of the TM for each type of region considered, we may give the formulae for the standard problems already mentioned for a wide class of potential profiles and mass distributions. We shall study the following problems:

- i) Transmission coefficient of the $(N+1)$ barriers between the points, a_1 and b_{N+1} .
- ii) Energy levels of stationary states of the N wells between the points b_1 and a_{N+1} (considering that the extreme barriers in figure 1 are impervious).
- iii) Energy levels of quasistationary states of the N wells potential open by one side (considering that one of the extreme barriers is non-penetrable).
- iv) Energy levels of quasistationary states of the N well potential open by the two sides.
- v) Energy bands of a periodical potential with unit cell of length "L" and with N wells at the energy considered.

In order to obtain the formula for problem i) we take an incident wave coming from $-\infty$ and calculate the fraction of the current density that arrives to $+\infty$. The transmission coefficient is then

$$T = \frac{1}{4|p|^2} \quad (23)$$

Problem ii) is considered by imposing the solution to be bounded at $\pm\infty$. We obtain as the transcendental equation for the energy levels the following:

$$w = 0 \quad (24)$$

If we consider the barrier open at its left side and imposing the solution to be bounded at $+\infty$ and an outgoing wave in $x < a_1$, we have the following transcendental equation for the complex energy of the quasistationary state:

$$f^* = 0 \quad (25)$$

For the problem iv) we impose that at both sides we have only outgoing waves, and we obtain

$$p^* = 0 \quad (26)$$

(In using (25) and (26) we must be careful: the energy must be treated as a real number in writing these equations for particular cases, but we search for their complex roots.)

The bands of a periodical problem are obtained in diagonalizing the TM of the unit cell $M(x+L, x)$ [2,3]. Here we shall consider the cases of well behaved potential profiles and mass distributions. For energies greater than the maximum of the potential, taking the TM corresponding to an allowed region reported in [6] with $x_2 = x_1 + L$, it can be shown that the equation for determining the energy bands is:

$$K(x_1 + L, x_1) = QL + 2n\pi \quad n \text{ is an integer} \quad (27)$$

where Q is the wave vector of the periodical problem. This dispersion relation implies an effective mass exactly equal to the classical one for constant mass, and its generalization when the mass is position-dependent [12].

For energies smaller than the maximum of the potential, simple expressions may be obtained in terms of the parameters p , t , etcetera (we may choose the unit cell in order to have a barrier or a well). In this case the effective mass that can be derived in this approximation differs to much from the classical one.

We remark that all formulae (23)-(27) are valid for both constant and position-dependent mass including potential profiles and mass distributions with points of jump of finite height. The main changes among them for different cases are the explicit form of the parameters in which terms we write the TM. (i.e. p , q , w , etcetera).

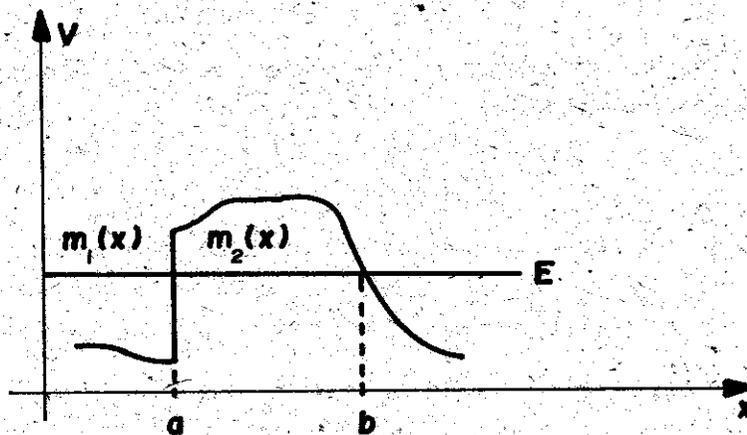


Figura 4. Model of potential of one barrier with one point of jump. Here it is suppose that $m(x)$ is $m_1(x)$ for $x < a$ and $m_2(x)$ for $x > a$, different in general

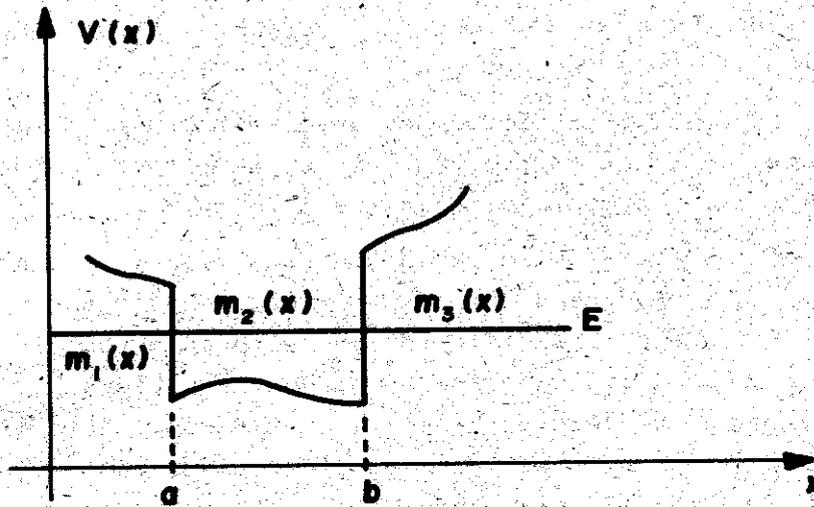


Figure 5. Model of potential of one well with two turning points of jump of finite height. $m(x)$ has three laws (different in principle) in depending on the region.

As examples of the application of the obtained results to particular examples for position-dependent mass we have:

For the barrier shown in figure 4 the transmission coefficient is:

$$T = \frac{4}{\left[\frac{m_1(a)\xi(a)}{m_2(a)k(a)} + \frac{m_2(a)k(a)}{m_1(a)\xi(a)} \right] \cosh\{2K(b,a) + \ln 2\} + 2} \quad (28)$$

which reduces to the known result [13] when $m(x) = \text{constant}$.

For the well shown in figure 5 we obtain for the levels the equation:

$$\tan(K(b,a)) = \frac{m_2(b)m_1(a)k_2(a)\xi_2(b) + m_3(b)m_2(a)k_2(b)\xi_1(a)}{m_3(b)m_1(a)k_2(a)k_2(b) - m_2(b)m_2(a)\xi_1(a)\xi_2(b)} \quad (29)$$

which reduces, for constant mass, to a result easily obtainable by the standard WKB method.

Here in (28)-(29) we have used the notation declared in (5).

5. CONCLUSIONS

We have developed the quasiclassical approximation for the class of Hamiltonians proposed to describe nonhomogeneous systems. The solution is the same for all of them because the term which make different one Hamiltonian from another give contributions of order \hbar^2 in the power series of the action, not considered in this approximation.

The connection rules we obtain for position-dependent mass are the same given for constant mass when the potential profile and mass distribution

are well behaved functions and conditions (9) must be considered when the mass has jumps of finite height.

The main influence of position-dependent mass in this approximation comes from the fact that in $K(c_2, c_1)$ we now have the dependence of mass and potential with the coordinate in the integrand.

We obtained the form of the TM in the quasiclassical approximation for constant and position-dependent mass for well behaved and specially for potential profiles and mass distributions with jumps of finite height. These results in addition with the recurrence relations and formulae (23)-(27) allows us to consider analytical and computational solutions of real multiple barrier systems in an easy and algorithmical way. To do so we start with the set of parameters of a well, or a barrier, etcetera (i.e. p and q ; or w , t , u , w , etcetera), in each case. We apply iteratively the recurrence relations given in [6] which are valid in any case with little changes. These changes become from the relations of α, β , etcetera with parameters (p and q , or w , t , u and v , etcetera). When we have only points of jump, not been turning points, we apply iteratively (20). In this way we obtain the corresponding parameters of the whole problem we are studying. Applying now (23)-(27), valid in any case considered, we solve the problem we are dealing with.

Finally we report formulae for particular cases of barriers and wells with position-dependent mass, already known to the case of constant mass.

BIBLIOGRAPHY

- [1] Bastard, G.
Phys. Rev. B24 5693 (1981).
- [2] Bastard, G.
Phys. Rev. B25 7584 (1982).
- [3] BenDaniel, D.I. and C.V. Duke
Phys. Rev. 152 683 (1966).
- [4] Milanovic, V. and D. Tjapkin
Phys. Stat. Sol. (b) 110 687 (1982).
- [5] Pérez Álvarez, R. and H. Rodríguez Coppola
Submitted to Physica Status Solidi (b). (About TM in
1D-Schrodinger problems).
- [6] Pérez Álvarez, R.; H. Rodríguez Coppola; J. López Gondar and M. Lago Izquierdo
Submitted to Physica Status Solidi (b). (About TM in quasiclas-
sical approximation).

- [7] Morrow, R.A. and K.R. Browstein
Phys. Rev. B 30 678 (1984).
- [8] Morrow, R.A. and K.R. Browstein
Phys. Rev. B 31 1135 (1985).
- [9] Landau, L.D. and E.M. Lifshitz
Quantum Mechanics (Pergamon Press) 1965. Pág. 159.
- [10] Abramowitz, M. and I.A. Stegun
Handbook of Mathematical Functions, pag. 446. Dover Publications
Inc. N.Y. (1972).
- [11] Hurewicz, V.
Lectures in Ordinary Differential Equations (MIT Press) 1966.
- [12] The derivation of the effective mass from equation (31) will appear
in Revista Cubana de Física.
- [13] Davydov, A.S.
Quantum Mechanics. (Edition Revolucionaria) Cuba 1965 pag. 81.

Coeficiente de absorción en superredes

Huberto Rodríguez Coppola, Melquiades de Dios Leyva y Rolando Pérez Álvarez
Departamento de Física Teórica. Universidad de La Habana

RESUMEN

Se describe el cálculo del coeficiente de absorción de un Pozo Cuántico Múltiple (MQW) en la aproximación de la función envolvente. Se comparan cualitativamente los resultados del cálculo con los obtenidos experimentalmente y con los de un cálculo realizado en la aproximación de enlace fuerte, encontrándose que nuestro modelo describe mejor al sistema que este último.

ABSTRACT

The scheme of calculation of the absorption coefficient of a multiple quantum well in the envelope function approximation is described. The calculation is compared qualitatively with experimental results and with tight binding calculation, obtaining that our model is better than the tight binding model for describing such a system.

INTRODUCCIÓN

Aunque las superredes se concibieron originalmente /1/ resaltando las propiedades relacionadas con el transporte de carga a lo largo de la dirección del eje de crecimiento, se ha prestado más atención en los últimos años a sus propiedades ópticas y al transporte cuasi-bidimensional en el plano de las capas.

Estas estructuras formadas por el crecimiento repetido alterno de capas de dos materiales A y B, han sido desarrolladas en compuestos del tipo III-V fundamentalmente, mediante la técnica de epitaxia por haces moleculares (MBE) /2/ primeramente, y más recientemente mediante la técnica de

Deposición de Vapores Químicos Metal-Orgánicos (MOCVD) /3/. De todos los sistemas, el de GaAs-AlGaAs ha sido el más estudiado tanto teórica /4-6/ como experimentalmente /7-9/.

El objetivo de este trabajo es presentar el cálculo del coeficiente de absorción de un pozo cuántico múltiple (MQW) en la aproximación de la función envolvente y comparar los resultados con otros cálculos.

MODELO TEÓRICO

El coeficiente de absorción en un MQW se calcula mediante: /10/

$$\alpha(\hbar\omega) = \frac{\alpha_0}{\hbar\omega} \sum_{k,q} \sum_{n,n'} |e \cdot P_{nn'}|^2 \delta[E(k,q) - E(k,q) - \hbar\omega] \quad (1)$$

siendo e el vector de polarización de la luz, $P_{nn'}(k,q)$ el elemento matricial del momentum entre los autoestados del MQW asociados a las subbandas n y n' , k y q son respectivamente las proyecciones del vector de onda en el plano de las capas y perpendicular a ellas, y α_0 es un factor constante.

Los autoestados del MQW se describen por:

$$\psi_{nj}(r) = 1/\sqrt{V} F_n(r) u_{j0}(r) \quad j=c,v \quad (2)$$

donde $u_{j0}(r)$ son las funciones de Bloch en el extremo de la banda y $F_n(r)$ serán las envolventes que se determinan de la ecuación de masa efectiva:

$$\{(-\hbar^2/2m_j^*)\nabla^2 + V_{MQW}(z) - E\} F_n(r) = 0 \quad (3)$$

Aquí n es un número cuántico asociado a la subbanda. El potencial del MQW será:

$$V_{MQW}^{(BC)}(z) = \begin{cases} \epsilon g_1 & \text{si } z > a/2 \\ \epsilon g_1 - V_0 & \text{si } z < a/2 \end{cases}; \quad V_{MQW}^{(BV)}(z) = \begin{cases} 0 & \text{si } z > a/2 \\ V_1 & \text{si } z < a/2 \end{cases} \quad (4)$$

que se origina teniendo en cuenta las diferencias en las bandas prohibidas de ambos materiales y las posiciones de las bandas respecto a un nivel de referencia común (electroafinidades).

Para el espectro discreto, la solución de (3) teniendo en cuenta el potencial (4) será:

$$\psi_n(z) = \begin{cases} A_j^{P,I} e^{k_{j1}z} & \text{si } z < -a/2 \\ B_j \cos(k_{j2}z) & \text{si } z < a/2 \text{ (estado par)} \\ C_j \sin(k_{j2}z) & \text{si } z < a/2 \text{ (estado impar)} \\ (-1)^{n+1} A_j^{P,I} e^{-k_{j1}z} & \text{si } z > a/2 \end{cases} \quad j=c,v \quad (5)$$

donde:

$$\begin{aligned} k_{c1} &= \sqrt{2m^*/\hbar^2 (\epsilon_{g1} - E_{cn})} & k_{v1} &= \sqrt{2|m_p^*|/\hbar^2 E_{vn}} \\ k_{c2} &= \sqrt{2m^*/\hbar^2 (E_{cn} - \epsilon_{g1} + V_0)} & k_{v2} &= \sqrt{2|m_p^*|/\hbar^2 (V_1 - E_{vn})} \\ A_j^P &= \frac{e^{k_{j1}a/2}}{\{1/k_{j1} + a/2[1 + (k_{j1}/k_{j2})^2] + k_{j1}/k_{j2}\}^{1/2}} \\ A_j^I &= \frac{e^{k_{j1}a/2}}{\{a/2[1 + (k_{j2}/k_{j1})^2]\}^{1/2}} \\ B_j &= A_j^P e^{-k_{j1}a/2} \sqrt{1 + (k_{j1}/k_{j2})^2} \\ C_j &= A_j^I \left[\sqrt{1 + (k_{j1}/k_{j2})^2} / (k_{j1}/k_{j2}) \right] \end{aligned} \quad (6)$$

Para el espectro continuo consideraremos que:

$$\psi_k(z) \propto e^{ikz} \quad (7)$$

En la región de energías de interés se consideraron transiciones discreto-discreto y continuo-discreto.

Para las transiciones discreto-discreto el coeficiente de absorción tiene forma de escalera determinada por:

$$\alpha_{d-d}(hw) = \alpha_d \mu^* / (hw) \sum_{n,n'} I_{nn'}^2 \quad (8)$$

siendo α_d un factor constante e $I_{nn'}$ la integral de las funciones envolvente de los pozos de BV y BC cuya expresión analítica encontramos y no reportamos por brevedad.

Para las transiciones continuo-discreto se desarrolló un método aproximado de cálculo sin tener en cuenta la forma del potencial; el resultado es el siguiente:

$$\alpha_{c-d}(\hbar w) = \alpha_{c\mu^*}(\hbar w) \sum_n \{Si[\alpha\gamma_n a] + Si[\alpha\gamma_n a+1]\} \quad (10)$$

donde $Si(x)$ /11/ es la función seno-integral, $\gamma_n = \sqrt{\hbar w - E_{cn}}$ y $\alpha = \sqrt{2|m^*|/\hbar^2}$.

Para desarrollar este cálculo se consideró la integral:

$$F_n(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dz \psi_n^c(z) \psi_n^c(z-x) \quad (11)$$

la cual tiene como comportamiento asintótico $\cos(x/a)$, para $x < a$, y $e^{-k_{cn}x}$ para $x > a$.

RESULTADOS

La comparación se realizó con un MQW de GaAs-AlGaAs para dos composiciones en la aleación: $x=0.25$ /9/ y $x=0.2$ /12/ y con los cálculos realizados en /12/ por el método de enlace fuerte.

Tanto nuestro cálculo como el de enlace fuerte adolecen de no considerar la interacción coulombiana entre el electrón y el hueco, luego la comparación con el experimento es sólo cualitativa. Para la realización del cálculo se emplearon para ambos pozos las siguientes masas efectivas:

$$m_e^* = 0.066m_0; m_{hh}^* = 0.45m_0; m_{lh}^* = 0.08m_0 \quad /9/.$$

El ancho del gap energético del AlGaAs se calculó mediante /13/:

$(E_g)_{Aleac} = (E_g)_{GaAs} + \Delta E_g$; $\Delta E_g = 1,155x + 0,37x^2$ si x composición de la aleación. Para determinar los potenciales de los pozos de BC y BV se empleó el criterio dado en /9/.

TABLA 1

Diferencias de energía entre estados de BC y BV que corresponden a diferentes picos excitónicos (número n)

COMPOSICION MUESTRA: $x=0,2$ /9/

a(A)	n	TRANSIC	$\Delta E(eV)$	a(A)	n	TRANSIC	$\Delta E(eV)$	n	TRANSIC	$\Delta E(eV)$
140	1	HH1-CB1	1,5218	210	1	HH1-CB1	1,5111	2	HH2-CB2	1,5441
		HH3-CB1	1,5420			HH3-CB1	1,5221		HH4-CB2	1,5599
		LH1-CB1	1,5284			HH5-CB1	1,5373	LH2-CB2	1,5589	
	2	HH2-CB2	1,5856		3	HH3-CB3	1,5979	4	HH2-CB4	1,6539
		LH2-CB2	1,6040			HH1-CB3	1,5869		HH4-CB4	1,6697
	3	HH3-CB3	1,6833		3	HH5-CB3	1,6131	4	LH2-CB4	1,6687
		LH1-CB3	1,6697			LH1-CB3	1,5910			
		HH1-CB3	1,6631							

COMPOSICION MUESTRA: $x=0,25$ /12/

ANCHO (Å)	n	TRANSIC	ΔE (eV)	ANCHO (Å)	n	TRANSIC	ΔE (eV)
192,202	1	HH1-CB1	1,5132	192,202	3	HH3-CB3	1,6175
		HH3-CB1	1,5264			HH1-CB3	1,6043
		LH1-CB1	1,5284			LH1-CB3	1,6093
	2	HH2-CB2	1,5528		4	HH2-CB4	1,6852

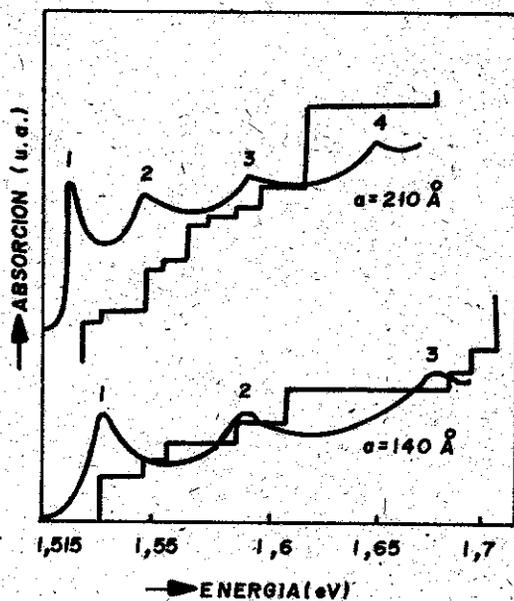


FIG. 1/9/

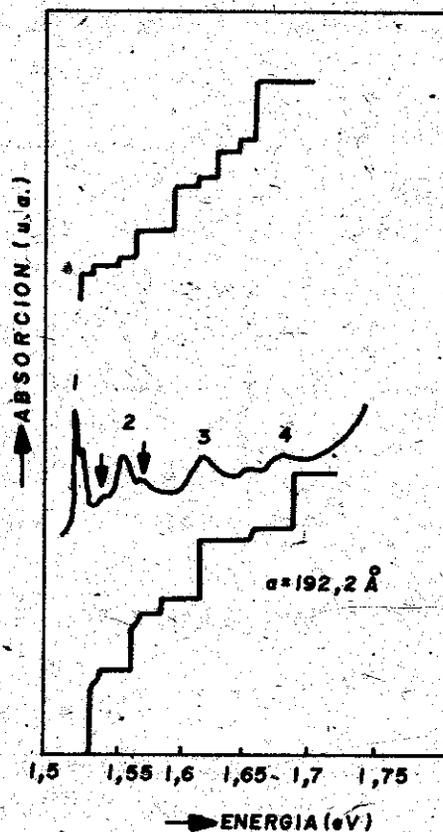


FIG. 2/12/

Como se observa en la figura 2 nuestro cálculo reproduce mejor la posición energética de las transiciones que el cálculo de enlace fuerte. En /12/ se analizan transiciones del tipo LH1-CB2 y HH1-CB2, las que en nuestro cálculo aproximado están prohibidas por la paridad de las funciones. Así mismo, nuestro cálculo demuestra que a los picos excitónicos contribuyen estados diferentes de las BV a un mismo estado de BC; lo que no aparece así en el cálculo de enlace fuerte.

Los picos marcados en la figura 2 por flechas son explicados por nosotros como las transiciones HH5-CB1 ($\Delta E=1,5433\text{eV}$) y HH4-CB2 ($\Delta E=1,5719\text{eV}$) con HH2-CB2 ($\Delta E=1,5709\text{eV}$), lo que no explica el otro cálculo. En todos los casos se observa que la interacción coulombiana entre electrón y hueco disminuye la energía del par.

CONCLUSIONES

Se puede observar que el análisis de MQW como un pozo rectangular fija cualitativamente los resultados experimentales y que el método de la función envolvente resulta satisfactorio para analizar estos sistemas. Esto no debe ser así para capas estrechas pues la teoría de masa efectiva no es aplicable.

BIBLIOGRAFÍA

1. Esaki, L. y R. Tsu
IBM J. Res. Develop. 14, 61 (1970).
2. Cho, A.Y. y J. Vac
Sci & Technol. 8, 331 (1971).
3. Dupuis, R.D.; P.D. Dapkus; N. Holonyak y R.M. Kolbas
Appl. Phys. Lett. 40, 877 (1982).
4. Bastard, G.; E.E. Méndez; L.L. Chang y L. Esaki
Phys. Rev. B 26, 1974 (1982)
5. Bastard, G.
Phys. Rev. B 24, 4714 (1981).
6. Mailhiot, G.; Y.C. Chang y T.C. McGill
J. Vac. Sci. & Technol. 21, 519 (1982).
7. Weisbuch, G.; R.C. Miller, R. Dingle y otros
Solid State Commun. 37, 219 (1981).
8. Miller, R.C.; A.C. Gossard; W.T. Tsang y O. Munteanu
Phys. Rev. B 25, 3871 (1982).
9. Dingle, R.; W. Wiegmann y C.H. Henry
Phys. Rev. Lett. 33, 827 (1974).
10. Véase por ejemplo F. Bassani y G. Parravicini
Electronic States and Optical Transitions in Solids, Pergamon,
N.Y., 1975, Cap. 7.
11. Abramowitz, M. e I.A. Stegun
Handbook of Mathematical Functions, Ed. Nauka, Moscú, 1979.
En ruso. Pág. 55.

12. Yia-Chung, Chang y J. Schulman
Appl. Phys. Lett. 43, 536 (1983).
13. Lee, H.J. ; L.Y. Jurevel; J.C. Wooley y A.J. SpringThorpe
Phis. Rey. B 21, 659 (1980).

Fabricación de celdas solares de silicio monocristalino con superficie texturada

J. Almeida, N. Safronova y A. Martel
Laboratorio de Investigaciones en Electrónica del Estado Sólido (LIEES)
Facultad de Física, Universidad de La Habana

RESUMEN

Se presenta el proceso tecnológico utilizado en la obtención de celdas solares de silicio monocristalino de superficie texturada basándose en el método de aleación de aluminio. A partir de las características volt-ampéricas y de respuesta espectral se analizan los principales parámetros de dichos dispositivos, comparando los resultados obtenidos para celdas con contactos de Ti/Pd/Ag y de Ti/Ni/Cu.

ABSTRACT

The technological process to obtain texturized surface Si solar cells based on an Al alloy method is presented.

The main device parameters are determined from I-V and spectral response characteristics.

The results of using Ti/Pd/Ag and Ti/Ni/Cu for cell contacts are compared.

SIMBOLOGÍA

- FF - factor de llenado.
- j_{cc} - densidad de corriente de cortocircuito.
- S - sensibilidad.
- V_{ca} - voltaje a circuito abierto.
- η - eficiencia.
- λ - longitud de onda.

I. INTRODUCCIÓN

Durante varios años las celdas solares de silicio monocristalino han sido fabricadas e investigadas en nuestro laboratorio. Partiendo de la tecnología convencional que comprende: oxidación gruesa, difusión para la obtención de una juntura profunda, capa antirreflectante sobre la superficie pulida y contactos por fotolitografía directa [1-2], hemos llegado a un proceso tecnológico más sencillo que permite la obtención de dispositivos con una eficiencia entre un 12 y un 14 % bajo iluminación AM1 y que puede ser introducida en la producción industrial.

El objetivo de este trabajo es presentar la tecnología desarrollada que puede ser un punto de partida y referencia para la obtención de celdas solares de área grande a bajo costo.

II. PROCEDIMIENTO DE FABRICACIÓN

Como material de partida se utilizó silicio monocristalino tipo p con orientación (100), 450 μm de espesor y resistividades entre 0.1 y 10 $\text{ohm}\cdot\text{cm}$.

El proceso de fabricación se muestra esquemáticamente en la figura 1.

La textura se hizo sumergiendo las obleas en una solución de hidróxido de potasio al 10 % de concentración en agua deionizada a la cual se le añade alcohol isopropílico a una temperatura de 80 $^{\circ}\text{C}$. Como resultado se obtienen pirámides con una altura promedio de 5 μm tal como puede verse en la figura 2.

La limpieza química se hace con vistas a la eliminación de sustancias orgánicas e iones de metales pesados de la superficie de la oblea. Para ello se utiliza como solventes orgánicos tricloroetileno y acetona así como ácido nítrico, ácido fluorhídrico y ácido sulfúrico.

La juntura p-n se obtuvo por difusión de fósforo haciendo pasar nitrógeno por una fuente líquida de oxiclورو de fósforo en un horno de cuarzo convencional en presencia de oxígeno a temperaturas entre 850 y 970 $^{\circ}\text{C}$ lográndose resistividades laminar entre 20 y 60 ohm/\square .

Después de eliminado el fosforosilicato se deposita aluminio en la cara posterior por evaporación al vacío y es aleado a 800 $^{\circ}\text{C}$ en atmósfera de hidrógeno. Esto permite la compensación de la juntura espúrea así como la formación de una capa p^+ , para la utilización del mismo sistema de contactos aplicado al emisor. La resistividad de esta capa es menor que 100 ohm/\square .

El delineado de la rejilla colectora se hace por técnicas de lift-up, utilizando fotoresina AZ 1350J tratada con clorobenceno [3]. Posteriormente se evaporan al vacío capas metálicas de aproximadamente 60, 20 y 100 nm de titanio, paladio y plata respectivamente sobre un sustrato no calentado.

Para la obtención del contacto posterior se evapora el mismo tipo de contactos.

Después de llevar a cabo un desbaste mecánico de los bordes, se depositan por pulverización catódica reactiva 80 nm de Si_3N_4 que actúa como capa antirreflectante.

También se hicieron dispositivos con contactos formados mediante la evaporación de titanio, níquel y cobre de espesores aproximados 60, 20 y 120 nm.

III. CARACTERIZACIÓN

Con este objetivo se hicieron mediciones de las características I-V bajo radiación artificial con una lámpara de halógeno así como de la respuesta espectral en el rango entre 400 y 1200 nm.

De esta forma nos fue posible calcular los parámetros eléctricos que caracterizan las celdas fabricadas.

En la figura 3 vemos una curva I-V iluminada antes de depositar la capa antirreflectante para una celda típica cuya juntura fue realizada a 850 °C sobre un sustrato de una resistividad 3 ohm cm utilizando contactos de Ti/Pd/Ag.

La sensibilidad espectral de esta celda se muestra en la figura 4, donde podemos ver que es similar a la reportada para celdas de silicio monocristalino para uso terrestre [4].

En los dispositivos en que se utilizaron contactos de titanio/níquel/cobre, se obtuvieron características semejantes a las que se logran con contactos de titanio/paladio/plata, estos contactos son más baratos y pueden ser aplicados exitosamente en celdas solares para uso terrestre, más es necesario tener en cuenta que los tratamientos térmicos que se utilicen no deben exceder los 350 °C pues ello provocaría la difusión del Ni y/o del Cu hacia la juntura del dispositivo empeorando sus características [5,6].

Se comprobó que la deposición de 80 nm de Si_3N_4 , espesor óptimo para celdas de superficie especular [2] sólo aumenta en un 7 % la densidad de corriente en nuestras celdas para radiación directa, por lo que pueden fabricarse celdas solares de superficie texturada sin aplicarle capa antirreflectante pues esto no justifica un aumento de la eficiencia considerable redundando en un dispositivo más barato.

IV. CONCLUSIONES

Se ha logrado obtener un proceso tecnológico para la fabricación de celdas solares que es fácilmente repetible y sencillo, además puede ser

disminuido el costo de los dispositivos fabricados usando el sistema de contactos de titanio/níquel/cobre que fue puesto a punto con buenos resultados y es altamente promisorio.

AGRADECIMIENTOS

A los técnicos José Moreno y José Vilahomat por su ayuda en la fabricación de las celdas.

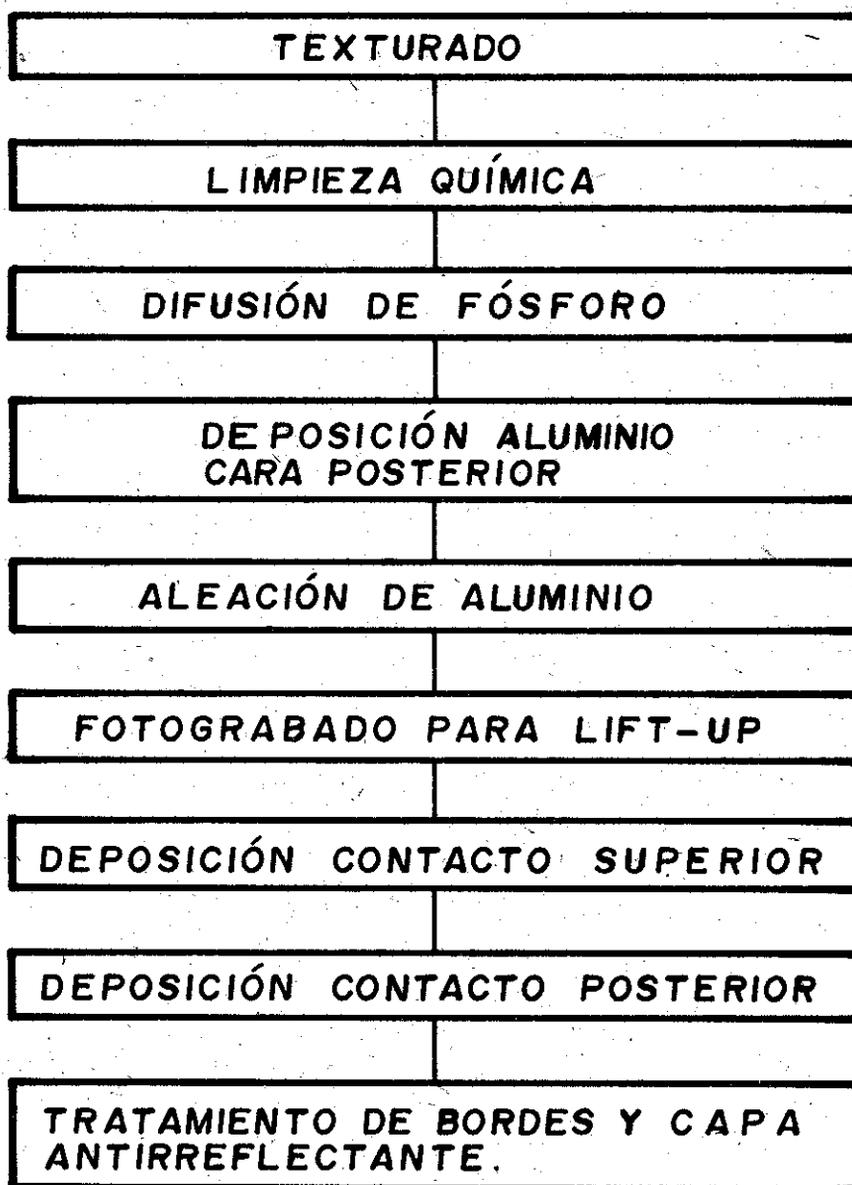


Figura 1. Secuencia tecnológica para la obtención de celdas solares

Figura 2. Fotografía obtenida por SEM de la textura de las celdas

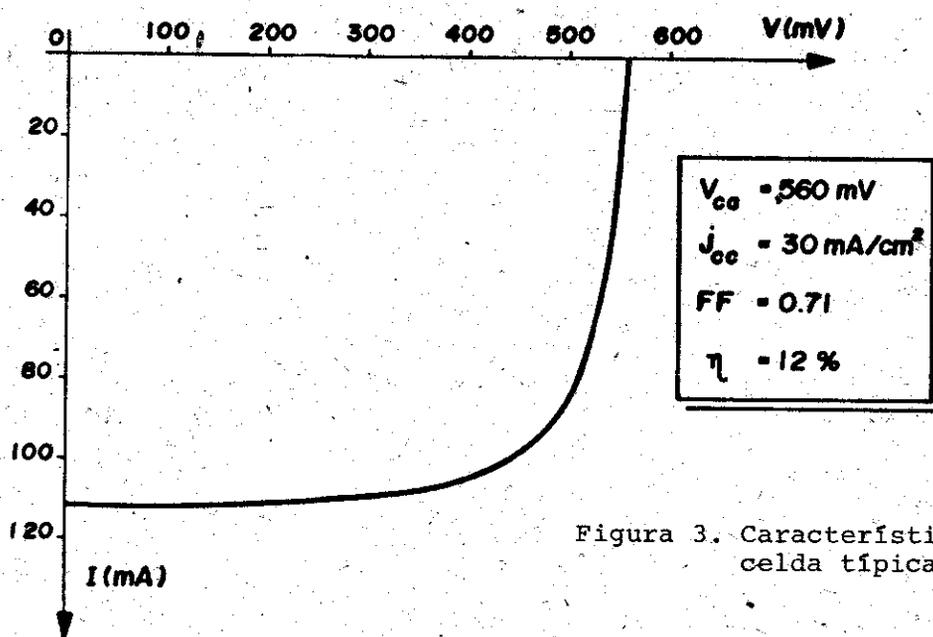
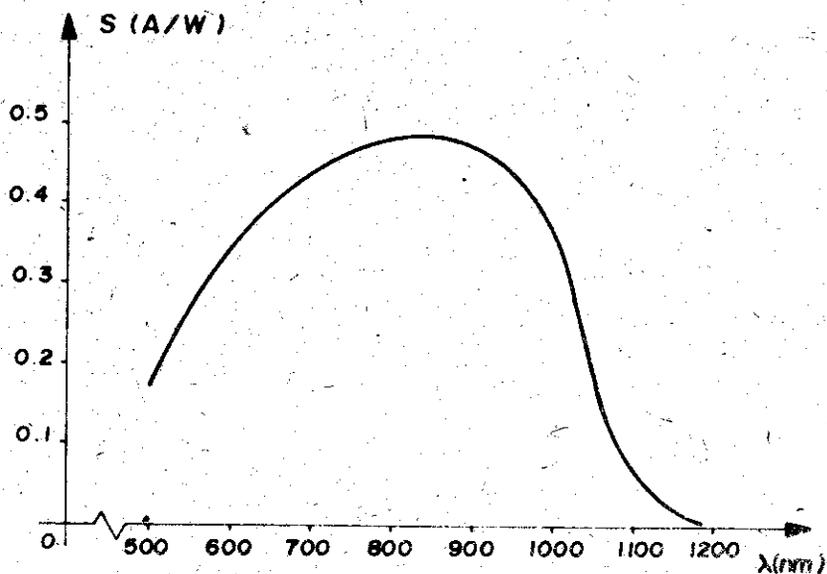


Figura 3. Característica I-V de una celda típica

Figura 4. Sensibilidad espectral de una celda típica



BIBLIOGRAFÍA

- [1] Martel, A.; S. Aguilera; N. Safronova and M. García
Characterization of single crystal silicon solar cells through illuminated I-V family curves. Cryst. Res. Technol. Vol. 20, No. 9, pp. 1261-1269 (1985).
- [2] García, M.; A. Martel; P. Rodríguez y S. Aguilera
Mejoramiento de las características ópticas y eléctricas de celdas solares de silicio monocristalino mediante el uso de capas antirreflektantes de nitruro de silicio. Física y tecnología de semiconductores, Vol. 3, (1984).
- [3] Belko, V.V.; N.E. Kalinina y B.E. Borisenko
Formación de la topología de los elementos de los circuitos integrados por el método de fotolitografía de explosión. Radiotekhnika i elektronika. No. 5 (312) pp. 3-39 (1987).
- [4] Ruiz, J.M. y M. Cid
Mismatch corrections of solar cell spectral response measurement with a reference cell. 5th European Symposium, La Haya, Oct. (1986).
- [5] Meier, D.L.; R.B. Campbell; J.R. Davis et al.
Solar cell contacts. 16th IEEE Photovoltaic Spec. Conf. San Diego, Calif. 1982, Conf. Rec. New York, N.Y. pp. 904-906 (1982).
- [6] Jing-xiao, Wang
An investigation of copper contact for use in silicon solar cells. 17th IEEE Photovoltaic Spec. Conf. Kissimmee Fla. 1-4 May. 1984. New York, N. Y. pp. 580-583 (1984).

Características de alta frecuencia de ferritas de NiZnCo obtenidas por síntesis húmeda

F. González Quevedo, I. Guerasimenko, R. Bermúdez y O. Pérez
Laboratorio de Magnetismo, IMRE, Universidad de La Habana

RESUMEN

Utilizando el método de síntesis húmeda con oxidación se obtienen polvos de ferrita en la composición $\text{Ni}_{0,596}\text{-Zn}_{0,144}\text{Co}_{0,017}\text{Fe}_{2,151}\text{O}_{4,47}$. Los materiales obtenidos con estos polvos muestran frecuencias de corte superiores a 130 MHz y productos μQ superiores a 2000 a 100 MHz. Se realiza una evaluación de los materiales obtenidos y de los mecanismos que regulan sus pérdidas a alta frecuencia.

ABSTRACT

By means of the wet method, ferrites powders with composition $\text{Ni}_{0,596}\text{Zn}_{0,144}\text{Co}_{0,017}\text{Fe}_{2,151}\text{O}_{4,47}$ are obtained. The cores sintered from these powders show a practical high frequency limit over 130 MHz, and a μQ product over 2000 at 100 MHz. An evaluation of these materials is done, as well as the mechanism which control the losses at high frequency.

INTRODUCCIÓN

Las ferritas de NiZnCo tienen propiedades que permiten su aplicación en la técnica de alta frecuencia en el rango de 50-150 MHz. Estos materiales suelen obtenerse partiendo de mezclas de óxidos, o de materiales que conducen a la obtención de tales mezclas.

Ha sido reportado (1) que estos métodos de obtención no son adecuados para la obtención de materiales de alta frecuencia, ya que introducen diferentes tipos de inhomogeneidades e impurezas y no permiten un control adecuado de la distribución del tamaño de partícula en los materiales sin-

terizados. Ha sido reportada (2) la utilización de métodos húmedos como alternativa ventajosa para la obtención de ferritas de NiZnCo con frecuencias de corte superiores a 200 MHz. Estos métodos implican el secado y la descomposición de soluciones de sulfatos y la utilización de técnicas especiales de prensado, por lo que no son comúnmente utilizados en la industria para la producción de estos materiales. Por otra parte la descomposición de sulfatos en cantidades industriales está asociada a la posibilidad de contaminación ambiental.

En este trabajo se reporta la obtención de ferritas de NiZnCo con frecuencias de corte superiores a 130 MHz utilizando como método de obtención de los polvos la coprecipitación y oxidación de hidróxidos (síntesis húmeda oxidante). Estos materiales han sido obtenidos utilizando técnicas tradicionales de prensado y en el proceso tecnológico se excluyen totalmente las mezclas y molidas con sus correspondientes pasos de secado. Los materiales obtenidos por síntesis húmeda presentan un producto μQ a 100 MHz superior al de materiales de alta frecuencia que han sido obtenidos en nuestro laboratorio utilizando técnicas tradicionales.

PARTE EXPERIMENTAL

Método de preparación de los polvos:

El método de síntesis húmeda consiste en la coprecipitación homogénea en forma de hidróxidos de una solución acuosa de sales y su posterior oxidación con aire a temperaturas menores que 100 °C. De acuerdo con el estado de los iones Fe en solución, existen dos variantes del método (3):

1. Método de oxidación:

Se parte de una solución en la cual todos los cationes son divalentes y una vez coprecipitados, la suspensión se oxida mediante el burbujeo de aire a una temperatura comprendida entre 60 y 100 °C.

2. Método de neutralización:

La fase espinela se obtiene partiendo de una solución en que los iones de Fe son mayoritariamente trivalentes, este proceso se realiza en ausencia de oxígeno.

En nuestro caso se utiliza el método de oxidación. Se parte de una solución de sulfatos de pureza analítica que contiene a los cationes en la proporción deseada en el material dado. Después de la coprecipitación con una solución de hidróxido de sodio, la suspensión formada por los hidróxidos insolubles de Ni, Zn, Co y Fe se lleva a la temperatura de 80 °C y bajo una agitación vigorosa se burbujea aire a un flujo de 1L/min con el objetivo de oxidar el precipitado intermedio y obtener como producto final la fase espinela. El pH de la suspensión se mantuvo por encima de 10. Una vez

concluida la reacción se procedió al lavado y filtrado reiterado del precipitado para eliminar los restos de hidróxido de sodio formado durante la precipitación. Para llevar a cabo todo el proceso se construyó el reactor que se observa en la figura 1.

Preparación de los toroides

Utilizando polvos de la mezcla de tres remesas de 100 g cada una, obtenidas según se describe anteriormente, se prensaron toroides con 22 mm de diámetro externo, 8 mm de diámetro interno y 6 mm de altura. Estos toroides fueron hechos con polvos de dos tipos:

Grupo A: Polvos no sometidos a tratamiento térmico previo a la sinterización.

Grupo B: Polvos sometidos a tratamiento térmico a temperaturas de 500 900 °C antes de la sinterización.

Los toroides se prensaron a 2.5 T/cm², con un contenido del 1.7 % de alcohol de polivinilo.

La sinterización se llevó a cabo al aire, a temperaturas comprendidas entre 1100 °C y 1200 °C.

RESULTADOS EXPERIMENTALES Y DISCUSIÓN

Caracterización de los polvos obtenidos en el reactor

El análisis cuantitativo por absorción atómica de los polvos arrojó la composición $Ni_{0.596}Zn_{0.144}Co_{0.017}Fe_{2.150}O_{4+\gamma}$. El tamaño promedio de los granos del polvo es inferior a 0.2 μm . La superficie específica de los polvos es de 50 m²/g. En la figura 2(a) se observa la diferencia de la magnetización específica de saturación, σ_s medida a 25 °C para polvos tratados térmicamente al aire, entre 100 °C y 1200 °C, sufriendo un posterior enfriamiento brusco desde la temperatura de tratamiento. A 200 °C los polvos pierden casi el 50 % de su magnetización específica inicial. La curva dinámica de σ_s vs. temperatura en la figura 2(b), indica la presencia de por lo menos dos fases ferromagnéticas en el material, una de las cuales tiene una temperatura de Curie de 600 °C. En la figura 3 se muestran las temperaturas de Curie de los polvos obtenidos en el reactor en dependencia de las temperaturas de tratamiento térmico.

Los espectros Mössbauer de los polvos tratados entre 100 °C y 1200 °C se muestran en la figura 4. Entre 600 y 900 °C los espectros Mössbauer ganan en definición y a 1200 °C aparece la relación correcta entre las intensidades de las líneas, sugiriendo la formación completa de la fase espinela en este rango de temperaturas.

Los patrones de Debye-Scherrer de los polvos no tratados térmicamente muestran las líneas características de una espinela con parámetro de red

$a = 8.385 \text{ \AA}$, así como líneas débiles que coinciden en posición y relación de intensidades con las líneas más fuertes del $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ y $\beta\text{-FeOOH}$.

En la figura 5 se observa el termograma para los polvos salidos del reactor, observándose un pico endotérmico a 95°C , probablemente asociado a la evaporación del agua absorbida en la superficie de los granos así como varios picos exotérmicos superpuestos entre 170°C y 370°C . La ausencia del fuerte pico exotérmico entre 400°C y 460°C , característico de la transformación $\alpha \rightarrow \beta$ sugiere que el material no contiene $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$. Entre 600°C y 900°C la amplia región exotérmica presente sugiere un proceso de recristalización, seguido de sinterización a temperaturas superiores a 960°C . Los resultados obtenidos demuestran que los polvos que se obtienen a la salida del reactor no son monofásicos, estando constituidos mayoritariamente por una fase espinela magnética, con temperaturas de Curie cercanas a 600°C y con una magnetización específica superior a 60 emu/g . Esta fracción magnética presumiblemente consiste en magnetita, o una combinación de la misma con ferrita de níquel, y está acompañada de otras fracciones, posiblemente $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ e hidróxidos de hierro y ferritas de NiZn con alto contenido de Zn.

Determinación de la constante $|K_1|$ de anisotropía magnética

El valor absoluto de la anisotropía magnética fue determinado utilizando la resonancia ferromagnética (RFM). Para ello, partiendo de muestras policristalinas del grupo A y de muestras elaboradas desde mezclas de óxidos puros, en la misma composición, se prepararon materiales sinterizados, de los cuales se prepararon esferas de diámetros comprendidos entre $0,5$ y $0,7 \text{ mm}$, las cuales fueron pulidas a espejo con polvos abrasivos de menos de $2 \mu\text{m}$. La densidad de los materiales sinterizados se midió utilizando un método hidrostático, con corrección para la porosidad abierta y con una repetibilidad de 0.01 g/cm^3 . El ancho de línea de RFM se determinó para una frecuencia de 9.1 GHz , con un barrido de campo de 1000 Oe/min y utilizando un resonador de paso. Los resultados de dichas mediciones se observan en la figura 6, donde se puede establecer que existe una relación aproximadamente lineal, acorde con el modelo suministrado por Schlomann (4), según el cual el ancho de línea de RFM, representado en lo que sigue por $2\Delta H$, está relacionado con la porosidad del policristal magnetizado a saturación según la ley:

$$\Delta H_{\text{pol}} = \Delta H_{\text{mono}} + \left| \frac{K_1}{M_0 \mu_0} \right| 1,5 \left(4\pi \frac{M_0}{\mu_0} \right) p$$

donde

ΔH_{pol} : ($2\Delta H$) para el policristal (Oe).

ΔH_{mono} : ($2\Delta H$) para el monocristal (Oe).

K_1 : constante de anisotropía magnética.

M_0 : magnetización de saturación.

p : porosidad

En nuestro caso $M_0 = 410$ G. Extrapolando a ($p=0$) en la recta ajustada a los puntos experimentales, se tiene que $2\Delta H = 150$ Oe.

Suponiendo un ancho de línea para el monocristal menor que 50 Oe, (5), entonces se tiene que $|K_1| > 6 \times 10^4$ erg/cm³, lo cual está en concordancia con lo reportado en (7, 8, 9), donde estos valores están comprendidos entre $1,7$ y 7×10^4 erg/cm³ para las ferritas de Ni y NiZn. Suponiendo que en el material fuera posible bloquear completamente el movimiento de las paredes de dominio, la frecuencia de resonancia por rotación de dominio quedará determinada por (6):

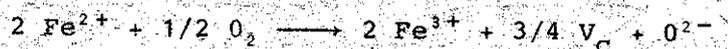
$$f_r = \frac{2}{3} |K_1| \gamma / \pi M_0 > 560 \text{ MHz}$$

la cual representa una cota a la frecuencia máxima de trabajo para nuestro material. La permeabilidad correspondiente a la rotación de dominios, quedaría determinada por (6).

$$\mu = 1 - \frac{4}{3} \frac{\gamma M_0}{f_r} < 17$$

Permeabilidad y pérdidas a altas frecuencias:

Se observa en la tabla 1 que las ferritas del grupo A no cumplen la relación predicha por Globus (10) entre la permeabilidad inicial y el tamaño promedio del grano. Esto puede estar asociado al efecto de la alta porosidad intragranular de nuestros materiales. Por otra parte, los poros intragranulares bloquean de manera incompleta las paredes de dominio, según (11), lo que permite explicar la baja frecuencia de corte observada en los materiales de este grupo. Los materiales del grupo B tienen tamaños de grano de 1 μm y aún menores. Esto se logra mediante un tratamiento térmico previo, el cual presumiblemente, disminuye la actividad de los polvos a la temperatura de sinterización. Los polvos tratados a 900 °C presentan una mejor compactación en el prensado que los polvos del grupo A y semejante a la de los polvos obtenidos por descomposición de óxidos; sin embargo, los materiales sinterizados presentan porosidades elevadas, del orden del 20 %. Esto último puede estar asociado a una sobreoxidación del polvo a la temperatura de 900 °C con la creación de una alta concentración de vacancias catiónicas, a través de una reacción del tipo (12):



y una posterior migración de las vacancias hacia las fronteras de grano en el proceso de sinterización. Los polvos del grupo B tratados a 900 °C presentan permeabilidades iniciales a baja frecuencia cercanas a las calcula-

das como de rotación pura para este material. Está reportado (13) que las fronteras de grano bloquean de manera eficiente el movimiento de las paredes de dominio, ya que al disminuir el tamaño de grano la relación entre la superficie y el volumen de los mismos aumenta, con lo que resulta una menor contribución de las paredes de dominio a los procesos dinámicos de magnetización.

Por otra parte, al reducir el diámetro de los granos, los mismos llegan a ser del orden del tamaño de los dominios y suponiendo granos esféricos, aislados por la porosidad del material, el radio crítico sería (6):

$$r_c = \frac{9\gamma\mu_0}{2M_s^2} \sim 0,9 \mu\text{m}$$

donde γ es la energía superficial de la pared de dominio a 300 K, siendo aproximadamente igual a $0,2 \text{ erg/cm}^2$ según (14). La predicción anterior se confirma, como tendencia, para las muestras 5, 6, 7 del grupo B. En particular, la muestra 5 presenta el menor tamaño de grano unido a la más alta porosidad, y para la misma el producto μQ a 100 MHz alcanza el valor 2050, lo cual representa un incremento del 50 % respecto a las muestras NAF-30, preparadas desde mezclas de óxidos y carbonatos y técnicas cerámicas convencionales.

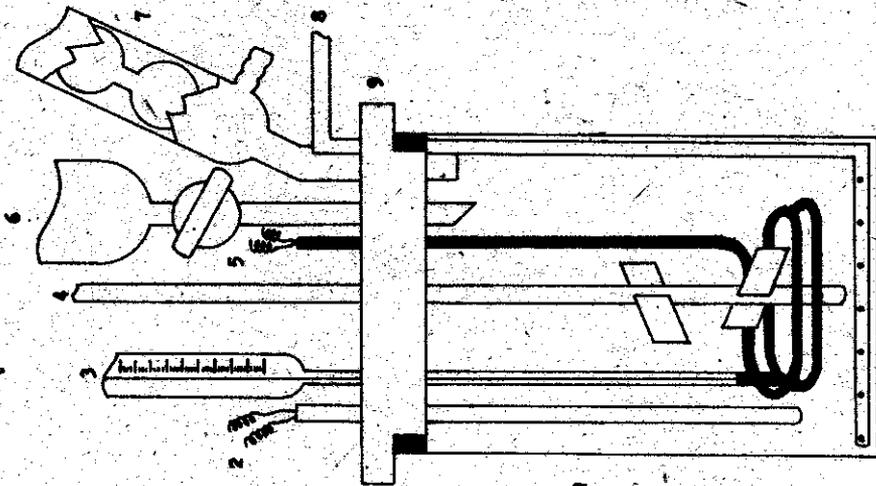
El bloqueo de las paredes por la microestructura es relativamente independiente de la temperatura y es por ello que la curva μ vs. T para estos materiales es relativamente estable, como se observa en la figura 7.

CONCLUSIONES

En los materiales obtenidos el aumento de la frecuencia de corte se logra a través del bloqueo de las paredes de dominio por una microestructura con pequeños tamaños de grano y alta porosidad. Un tratamiento previo a la sinterización a 900°C y sinterización al aire, a una temperatura de 1200°C permite obtener ferritas con un producto μQ a 100 MHz superior en 50 % a otras ferritas obtenidas en nuestro laboratorio utilizando técnicas convencionales. Se demuestra la posibilidad de obtener ferritas de NiZnCo con altos productos μQ a frecuencias superiores a 100 MHz utilizando el método de síntesis húmeda y técnicas convencionales de prensado y sinterización.

AGRADECIMIENTOS

A los integrantes del colectivo del Laboratorio de Magnetismo del Instituto Físico-Técnico Ioffe de Leningrado, y muy especialmente, a los compañeros A.G. Gurevich, M. Emirian y T.A. Chaplguina, por la ayuda prestada en la realización de las mediciones de RFM.



- 1 Recipiente de Vidrio
- 2 Control de Temperatura
- 3 Termómetro
- 4 Agitador
- 5 Calentador
- 6 Desecador
- 7 Condensador
- 8 Burbujeador
- 9 Tapa

Figura 1. Reactor para la obtención de polvos coprecipitados

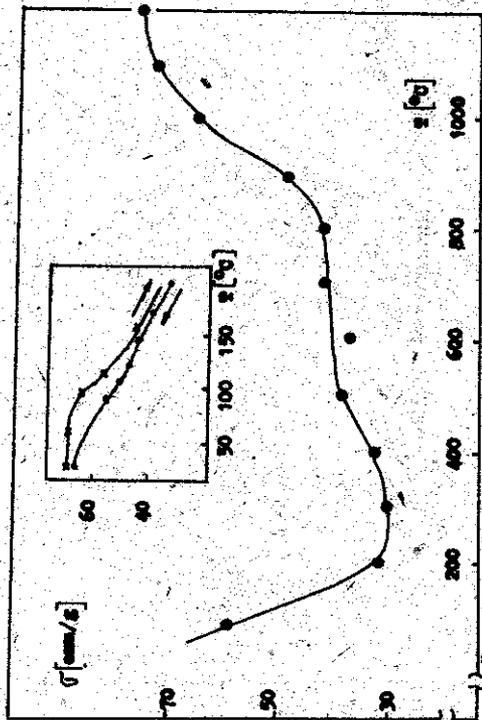


Figura 2.

- (a) Magnetización específica de saturación σ_g , medida a 20°C , para diferentes temperaturas de tratamiento al aire
- (b) Curva dinámica de σ_s vs. temperatura, entre 30° y 150°C

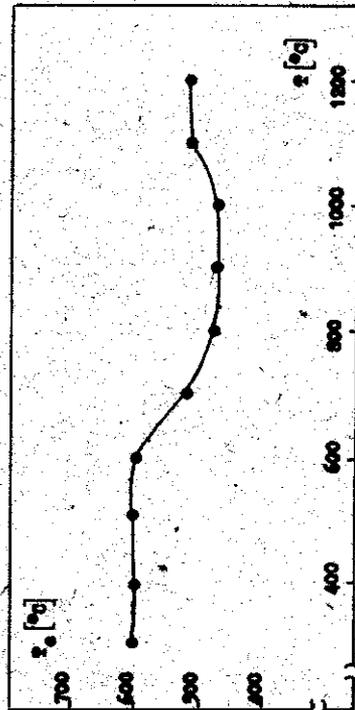


Figura 3. Temperatura de Curie del polvo en dependencia de la temperatura de tratamiento térmico al aire

Figura 4. Espectro Mössbauer de los polvos en dependencia de la temperatura de tratamiento térmico al aire

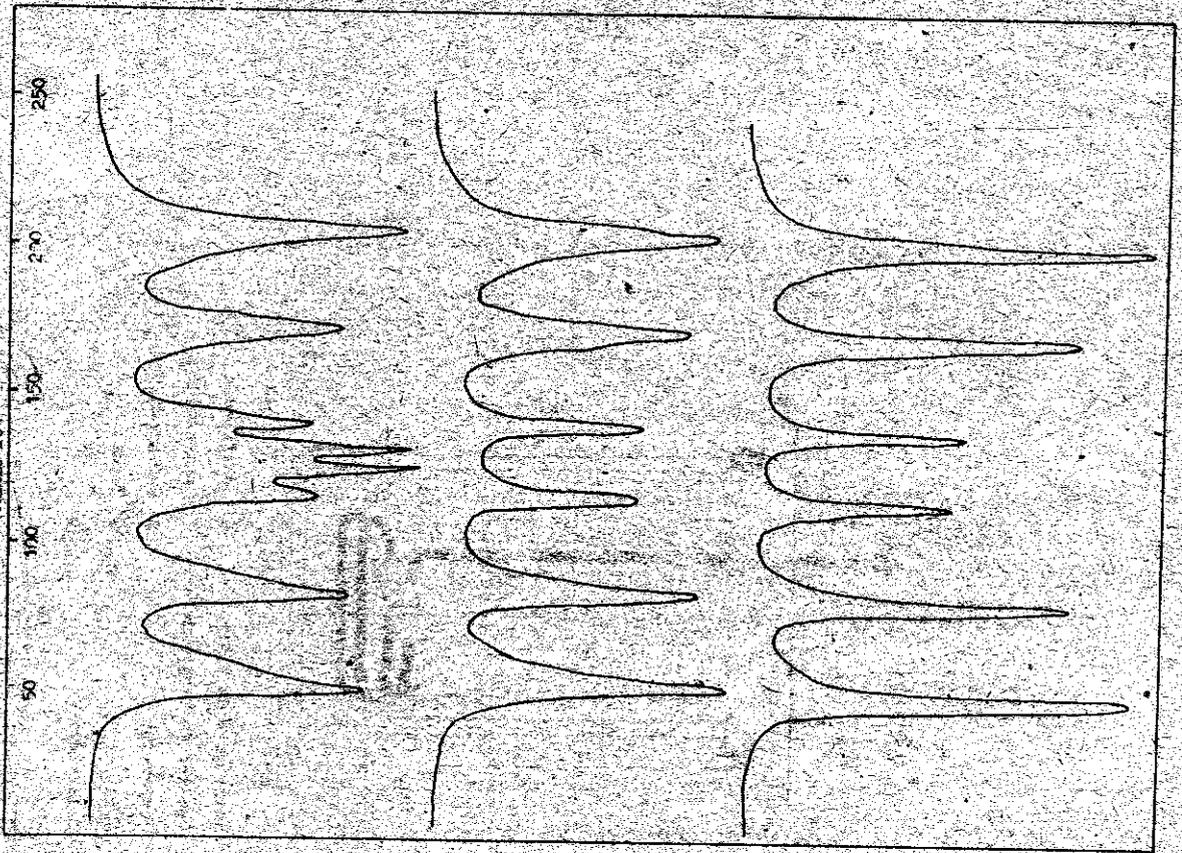
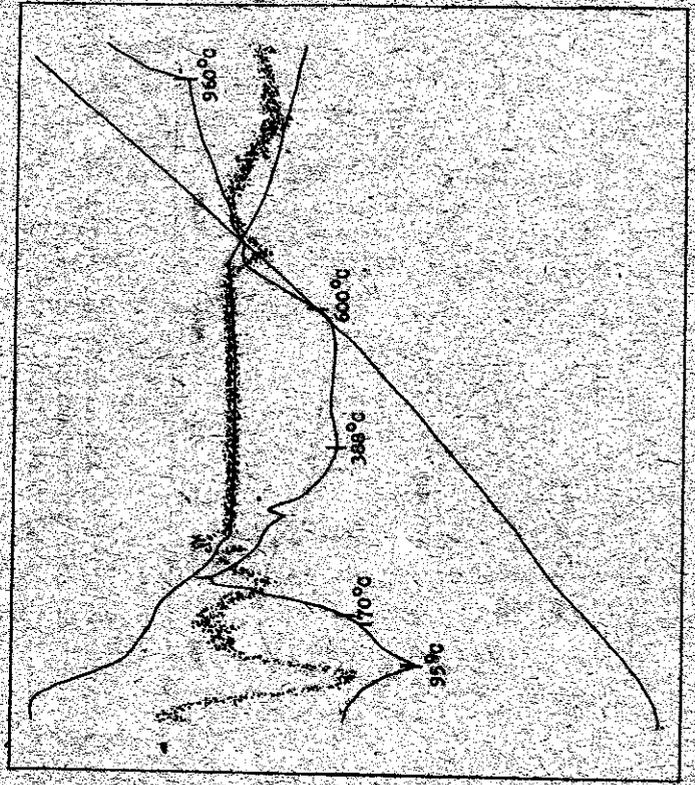


Figura 5. Termograma entre 30 y 1000 °C de los polvos.



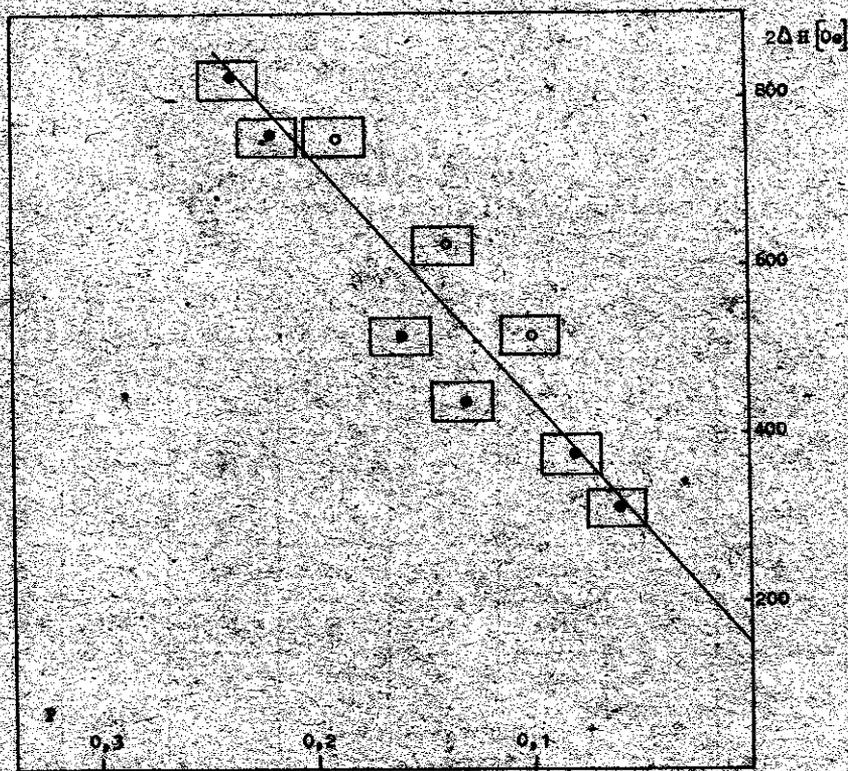


Figura 6. Ancho de la línea de RRM vs. porosidad del policristal

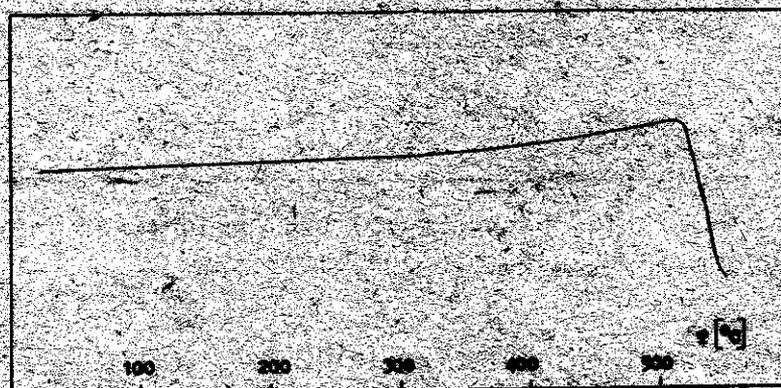


Figura 7. Dependencia de la permeabilidad con la temperatura de la muestra 5 del grupo B

Tabla 1. Características de las ferritas de NiZnCo sinterizadas.
 T_{tr} : temperatura de tratamiento térmico de los polvos,
 T_s : temperatura de sinterización al aire, P: porosidad,
 \bar{d} : diámetro promedio del grano, μ' : parte real de la permeabilidad a bajas frecuencias,
 μ''_c : valor máximo de la permeabilidad, $f_{0,1}$: frecuencia para la cual $Q=10$, $(\mu Q)_{100}$: producto μQ a 100 MHz

Tipo de muestra	No. de muestra	T_{tr} [°C]	T_s [°C]	P [%]	\bar{d} [μm]	μ'	μ''_c	$f_{0,1}$ [MHz]	$(\mu Q)_{100}$
A	1	-	1100	11	10 *	30	32	65	-
	2	-	1150	9	10 *	30	32	65	-
	I	-	1200	12	10	30	32	60	-
	IV	-	1200	9	10	30	32	60	-
B	3	500	1150	7	0,65	30	32	60	-
	4	500	1100	7	-	30	33	60	-
	7	900	1100	20	1,0	20	25	>130	1900
	6	900	1150	20	-	20	25	>130	2000
	5	900	1200	20	0,65	25	31	>130	2050
Cerámicas de óxidos y Carbonatos.	NAP-30	-	1200	20	2,0	36	48	120	1260

BIBLIOGRAFÍA

- (1) Lau, G.J.M. de; P.F.G. Bauguerts; J.L.H. Wijgergans y A.L. Stuijts
Ber, Dtsch. Keram. Gess. 52, 207, 1975.
- (2) Lau, J.G.M. de
Bull. Am. Ceram. Soc. 49, 572, 1970.
- (3) Schaefer M., H y J. Zacharias
Hermsdorfer Technische Mitteilungen, 54, 1735, 1979.
- (4) Schlömann, E.
Proc. Int. Conf. Mag. Mat. 600, 1957.

- (5) Srivastava, C.M.; M.J. Patni y N.G. Nanadikar
Journal de Physique, Colleque C1 supp. No. 4, Tome 38, pág. C1.
267, 1977.
- (6) Chikazumi, S.
Physics of Magnetism, N. York, 1966.
- (7) Potakova, V.A.; V.P. Romanov; N.D. Zverov; O.I. Gromovenko
E.V. Rubalskaya
Phys. Stat. Sol. (a) 4, 327, 1971.
- (8) Broese van Groen, A.; J.A. Schulkes y D.A. Annis
J. Appl. Phys. 38, 1133, 1967.
- (9) Enz, U. y J. Liebertz
Naturwiss. 51, 54, 1964.
- (10) Globus, A. y P. Duplex
IEEE Trans. Magn. Mat. 2 441, 1966.
- (11) Buck, G. y E. Ross
Phys. Stat. Sol. 31, 659, 1969.
- (12) Letiuk, L.M. y G. Yuravlov
Química y Tecnología de las Ferritas (ruso) Leningrado, 1983.
- (13) Globus, A. y P. Duplex
Phys. Stat. Sol. (a) 3, 53, 1970.
- (14) Guyot, M. y A. Globus
Journal de Physique, tome 38, pág. C1-157.

Sobreenfriamiento de las soluciones de sacarosa

Manuel Wong Quiñones e Irene Alegret Padrón, Instituto Cubano de Investigaciones Azucareras
Ramón Pomés, Academia de Ciencias de Cuba

RESUMEN

Se deduce que para una concentración constante existe una temperatura para la cual la velocidad de crecimiento de los cristales de sacarosa es máxima. Tomando datos de la literatura se obtiene la velocidad del crecimiento de los cristales en función de la temperatura y la concentración de una forma empírica. De este modo se estudia analíticamente este fenómeno y se determina la temperatura óptima.

Se comprueba este fenómeno de forma experimental creciendo monocristales de sacarosa en soluciones puras a una concentración determinada para diferentes temperaturas encontrándose de este modo la temperatura óptima.

ABSTRACT

There is a maximum in the growth rate of sucrose crystals if the concentration is held constant and the temperature is used as variable. The growth rate of sucrose crystals is expressed as function of concentration and temperature in an empirical way using data taken from sugar literature. The optimum temperature is then calculated.

The optimum temperature is determined experimentally by growing sucrose single crystals in pure solutions at several temperatures with the concentration held constant.

INTRODUCCIÓN

En la mayoría de los trabajos de cinética de la cristalización se mantiene la temperatura constante y la sobresaturación se obtiene aumentando la concentración por encima de la correspondiente a la saturación. Esto puede verse en textos elementales sobre la cinética de crecimiento (1-2).

Sin embargo, en la cristalización por enfriamiento es conveniente estudiar este fenómeno manteniendo la concentración constante y variando la temperatura por debajo de la temperatura de saturación.

El primer método es conveniente aplicarlo en casos o en procesos tecnológicos en que se mantiene la temperatura constante. No es así el caso de los cristalizadores en la industria azucarera.

En los cristalizadores, a diferencia de los tachos, la sobresaturación se obtiene por enfriamiento. A la descarga del tacho el licor madre donde se encuentran los cristales de sacarosa está sobresaturado, producto de esto mismo los cristales continúan creciendo y la sobresaturación disminuiría si la temperatura se mantuviese constante, la concentración del licor madre tendería entonces asintóticamente a la concentración de saturación. Para evitar esto la temperatura debe ir disminuyendo de manera de mantener una sobresaturación adecuada que contiene el crecimiento de los cristales.

En el caso de los tachos la sobresaturación se mantiene fundamentalmente evaporando y aumentando así la concentración.

Surge entonces la pregunta sobre de qué forma debe ir disminuyendo la temperatura en el caso de los cristalizadores, si existe una sobresaturación óptima a la cual este proceso debe ocurrir y si esta sobresaturación se mantiene constante o no.

Debe escogerse optimizar algún parámetro que sirva de criterio. A primera instancia puede escogerse la velocidad de cristalización, o sea, ver si existe un óptimo para este parámetro y de ser así, averiguar en qué condiciones ocurre este máximo.

El objetivo de este trabajo es probar en el caso de soluciones puras, si se mantiene la concentración constante, ver si existe una temperatura para la cual la velocidad de crecimiento es máxima y determinar a su vez este valor.

Otros autores han trabajado sobre esto mismo pero utilizando los métodos de la programación dinámica (3), también se han hecho evaluaciones de los cristalizadores pero sin variar las razones de enfriamiento (4) Atkiss (5) hizo un estudio similar pero estudiando su efecto en la pureza.

FUNDAMENTO DEL MÉTODO

La ecuación más sencilla que describe la cinética de crecimiento de los cristales de sacarosa es (6):

$$V = K(C - C_s) \quad 1$$

donde C es la concentración, C_s es la concentración a la temperatura de saturación y K es un parámetro que depende de la temperatura.

En realidad el mecanismo de crecimiento es bastante complejo y se han propuesto varias ecuaciones para describir tales procesos (7). Algunos a la diferencia de concentraciones la han elevado a una potencia determinada llamada orden de la reacción. Otros dentro de este mismo factor le han adicionado la misma velocidad multiplicada por el factor cinético de difusión. Otros han variado esta forma por completo y han utilizado una función hiperbólica. En general se obtienen mejores resultados si las concentraciones se trabajan con molalidad.

En este trabajo se utilizará la forma 1, debido a su sencillez con vista a su posible aplicación industrial ya que modelar el proceso de cristalización en la fábrica es bastante complejo, por ser muy dinámico y que el número de factores que afectan estos procesos es bastante amplio. Una ecuación más compleja dificultaría en un mayor grado poder establecer un modelo, y así como poder resolver analítica o numéricamente el mismo.

Luego el factor K en la expresión 1, incluye tanto el mecanismo de reacción, así como el mecanismo de difusión. La K depende de estos factores aproximadamente como la suma de los inversos:

$$\frac{1}{K} = \frac{1}{K_r} + \frac{1}{K_d}$$

donde K_r es la constante de los fenómenos que ocurren en la superficie y K_d es la constante para la difusión.

Además la forma 1 no considera el posible cambio del orden de reacción para bajas y altas sobresaturaciones, ni considera la concentración en la vecindad de la superficie que puede ser diferente a la del seno de la solución. Volviendo al objetivo de nuestro trabajo se debe analizar la ecuación (1) manteniendo la concentración constante.

En el caso de las soluciones puras, tanto K como C_s dependen de la temperatura. La forma analítica exacta de esta dependencia es bastante difícil de determinar la solubilidad porque es una solución altamente concentrada y en el caso de la K , por las aproximaciones que se han hecho de incluir ambos mecanismos anteriormente mencionados. Por ello desde el punto de vista práctico es mejor establecer una dependencia empírica, utilizando para ello polinomios de una potencia determinada en base a la aproximación que se desee exigir.

En la literatura azucarera existe una gran variedad de datos reportados de C_s a diferentes temperaturas. C_s se expresó utilizando el clásico método de los mínimos cuadrados, en función de la temperatura mediante un polinomio de segundo grado:

$$C_s = b_0 + b_1 t + b_2 t^2 \quad 2$$

en el rango de temperatura estudiado. Las b_i se hallan del sistema de ecuaciones lineales que se obtienen a partir de las ecuaciones normales. Se utilizaron los datos de solubilidad reportados por Charles (8).

En el caso de la K_1 se tomó los valores de crecimiento reportados por Smythe (9). Este trabajo es uno de los mejores en este aspecto por la minuciosidad con que se trabajó la parte experimental. En él se expresan los valores de crecimiento para distintos $C - C_s$ a temperatura constante. Aquí en el presente trabajo se aplicó el método de los mínimos cuadrados y se halló una K para esa temperatura. Como el trabajo de Smythe se hizo para varias temperaturas, se obtuvo en definitiva, diferentes K para diferentes temperaturas. Aplicando otra vez el método de los mínimos cuadrados, se expresó K en función de la temperatura, esta vez en base a un polinomio de segundo grado:

$$K = K_0 + K_1 t + K_2 t^2 \quad 3$$

una vez expresado C_s y K en función de la temperatura, esto se sustituyó en la expresión (1) quedando la velocidad de crecimiento en función de la temperatura y la concentración. O sea, sustituyendo las expresiones (2) y (3) en la (1) se obtiene:

$$V = (K_0 + K_1 t + K_2 t^2) (C - b_0 - b_1 t - b_2 t^2) \quad 4$$

Sobre la base de esto se puede efectuar una pequeña simulación matemática para ver cómo varía la velocidad de crecimiento al variar la temperatura. Para una concentración dada se le dio distintos valores de T a la expresión 4 y se calculó entonces la velocidad de crecimiento para estas temperaturas. Si hacemos un gráfico se ve esta curva por un máximo, o sea, que para una concentración dada existe una temperatura a la cual la velocidad de crecimiento es máxima. Este mismo procedimiento se repitió a varias concentraciones y se obtuvieron curvas similares.

Por otra parte, la relación entre la concentración C y la temperatura óptima puede hallarse por el método clásico derivando la expresión 4 respecto a la temperatura, suponiendo C constante e igualando a cero se obtiene de esta forma:

$$C = b_0 + b_1 T + b_2 T^2 + \frac{(Cb_1 + 2b_2 T)(K_0 + K_1 T + K_2 T^2)}{K_1 + 2K_2 T} \quad 5$$

Esta expresión me da una relación analítica entre C y la temperatura óptima. El primer término es la solubilidad y el segundo término desde el

punto de vista físico debe ser positivo para asegurar que la solución esté sobresaturada. El hecho de que este término dependa de T significará que la sobresaturación para estas condiciones óptimas no es constante, sino que depende de la temperatura.

La cuestión de que si es un máximo o un mínimo fue dilucidada mediante la pequeña simulación matemática donde se vio que los valores de la velocidad de crecimiento son menores a ambos lados del punto extremo.

PARTE EXPERIMENTAL

Se procedió a comprobar experimentalmente los resultados deducidos teóricamente. Se crecieron monocristales de sacarosa en solución pura a una concentración determinada a diferentes temperaturas y se halló para cual de ellas la velocidad de crecimiento era máxima. El control de la temperatura fue de $\pm 0.1^\circ\text{C}$.

Se utilizaron 11 monocristales de sacarosa de 1 cm de largo aproximadamente con una morfología adecuada. Para asegurar que la concentración fuera la misma para las diferentes temperaturas se utilizó la misma solución para cada concentración. Este procedimiento se repitió a diferentes concentraciones en un rango de 68 a 78 %.

La velocidad de crecimiento se determinó por diferencia de pesada utilizando una balanza analítica con una precisión de 0.0001 y los resultados se expresaron en $\text{mg}/\text{m}^2\text{xmin}$. El área del cristal se determinó por la fórmula de Kucharenko (10).

Los monocristales se crecieron 3 horas, en frascos sin agitación suspendidos por un hilo de nylon en el seno de la solución cuidando que la concentración de la solución no varíe apreciablemente con el crecimiento del cristal de forma que la sobresaturación no cambie en la segunda cifra decimal. El volumen de la solución fue de 300 mL.

El incremento del peso de los cristales varió de 100 a 200 mg y el error de la velocidad de crecimiento no excedió del 3 %.

RESULTADOS OBTENIDOS Y DISCUSION DE LOS MISMOS

En la figura 1 puede verse a modo de ejemplo la forma en que se comporta la velocidad de crecimiento en la temperatura manteniendo la concentración constante según los cálculos hechos de acuerdo con la expresión 2.

La presencia de este máximo puede verse de la siguiente forma: al disminuir la temperatura K disminuye y $C - C_s$ aumenta (C_s disminuye y C se mantiene constante); luego en un rango de temperatura predomina el primer factor y en el otro, predomina el segundo factor.

En el lado izquierdo del máximo en la figura 1 la velocidad de crecimiento disminuye al aumentar la temperatura porque disminuye considerable-

mente el factor $C - C_s$ y el factor total es que la velocidad disminuye a pesar de que K aumenta. Incluso al llegar a la temperatura de saturación el factor $C - C_s$ se hace cero y la velocidad de crecimiento se anula como es de esperar.

El lado derecho del máximo de la curva el factor predominante es K , ya que a pesar de que $C - C_s$ aumenta al disminuir la temperatura, K disminuye lo suficiente como para hacer que la velocidad de crecimiento disminuya. Esta parte es la más difícil de prever, ya que este resultado cualitativo está determinado por la dependencia con la temperatura de ambos factores. No obstante, es de esperar que a sobreenfriamientos demasiados pronunciados el efecto de la viscosidad sea tan grande que bloquee el mecanismo de crecimiento. Si la curva de la velocidad de crecimiento es continua y esta tiende a cero en los puntos extremos es de esperar que la misma tenga un máximo, ya que la posibilidad de $V = \text{constante} = 0$ o de que $V < 0$ queda excluida si es que la solución del licor madre en que se encuentra el cristal está sobresaturada.

La caída de la velocidad de crecimiento del lado derecho parece ser menos pronunciada que la del lado izquierdo.

El máximo en general está bastante cercano a la temperatura de saturación. Esto debe tenerse en cuenta al buscar el punto óptimo para evitar el peligro de que se puedan disolver los cristales. En todo caso es más seguro trabajar del lado derecho del máximo que del lado izquierdo.

Si se hubiera analizado este mismo problema con una ecuación de crecimiento más complicada por ejemplo:

$$V = K_r \left[M_0 (C-1) - V \frac{L}{D} \right]^n$$

donde: V - velocidad de cristalización

K_r - constante de reacción superficial

L/D - constante de difusión cinética

M_0 - modalidad de la sacarosa en saturación

n - orden de la reacción

C - constante de sobresaturación.

También se hubiera obtenido un resultado similar. Esta ecuación predice incluso la existencia de un máximo a temperatura constante si se aumenta suficientemente la sobresaturación. Para tener esto en cuenta en la expresión, habría que suponer también que K depende de la concentración.

En la tabla I puede observarse los resultados de los cálculos y algunas consideraciones de interés como son el sobreenfriamiento ΔT y la sobresaturación C/C_s que corresponden para estos puntos óptimos estando C expresada en g de sacarosa por 100 g de agua.

En la figura 2 se muestran los resultados experimentales de los óptimos y su comparación con los resultados teóricos.

Aquí puede verse la concordancia de los valores experimentales de estos máximos con los valores teóricos calculados sobre la base de datos tomados de la literatura. El valor del coeficiente de correlación es de 0.96 y de la suma del cuadrado de las desviaciones es de 0.67. El valor de estas diferencias no excede de 0.8 y estas están situadas a ambos lados de la recta. Esto comprueba las hipótesis planteadas inicialmente.

En la tabla I puede notarse que el sobreenfriamiento y la sobresaturación no se mantiene constante, sino que disminuye con la temperatura. Es un criterio generalizado entre los azucareros que el punto óptimo ocurre a una sobresaturación determinada independientemente de las condiciones en que se esté operando. En este trabajo vemos que esto no es así.

La sobresaturación para este óptimo no es muy alta, lo cual es favorable en el sentido de que se puede trabajar en este punto máximo sin el riesgo de que se forme falso grano. Por otra parte es desfavorable en el sentido de que al ser una sobresaturación no muy alta se corre el peligro de que se llegue al punto de saturación y se disuelvan los cristales.

La aplicación de este trabajo es la siguiente: en los cristalizadores a medida que los cristales van creciendo, estos van extrayendo sacarosa de la solución madre lo que hace que disminuya la concentración de la misma, para mantener la sobresaturación es necesario disminuir la temperatura y para lograr mantener la velocidad en su máximo posible; la temperatura no debe disminuirse de cualquier forma sino de manera que la solución se encuentre siempre en el punto óptimo.

Este trabajo es el primer paso al estudiar esto en soluciones puras.

En el caso de soluciones impuras el comportamiento cualitativo es de esperar que sea el mismo, lo que en este caso para los cálculos es necesario conocer además la dependencia de K y de C_s con las impurezas.

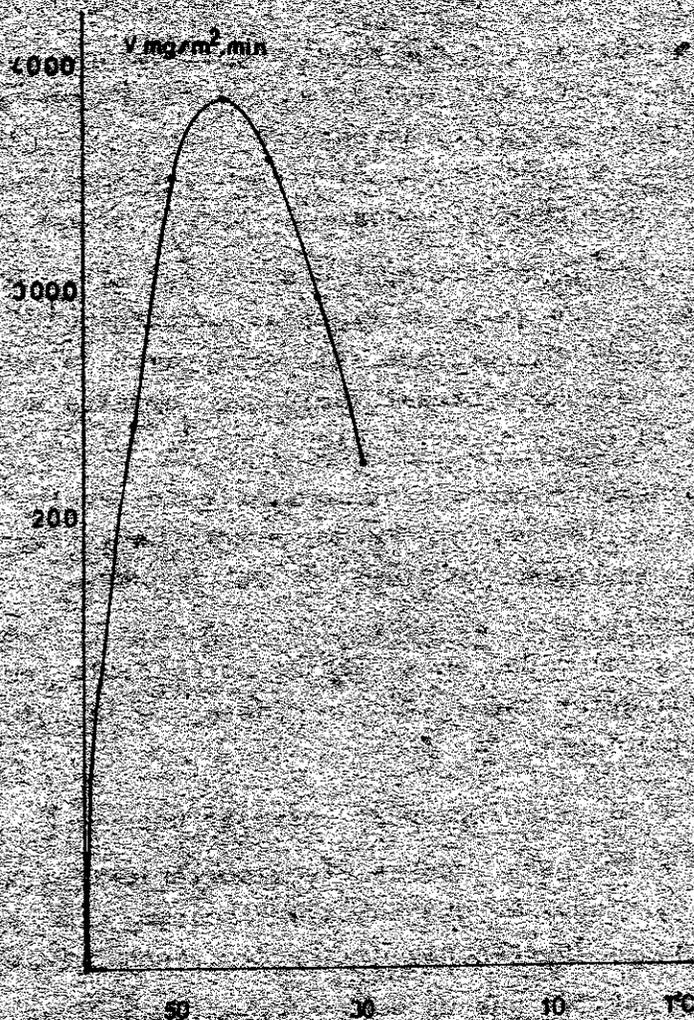
Ello es de esperar, ya que un sobreenfriamiento demasiado intenso aumentaría grandemente la viscosidad la cual bloquea los mecanismos de transporte en el seno de la solución.

CONCLUSIONES

Si la concentración de una solución de sacarosa se mantiene constante, existe una temperatura para la cual la velocidad de crecimiento de los cristales es máxima.

El valor de esta velocidad máxima y de la temperatura correspondiente es posible calcularla si se conocen los parámetros de la cinética de crecimiento (K y C_s) y la forma en que estos dependen de la temperatura.

Existe una buena concordancia entre los valores teóricos (calculados según el modelo y tomando datos de la literatura azucarera) y los valores experimentales de estos puntos óptimos.



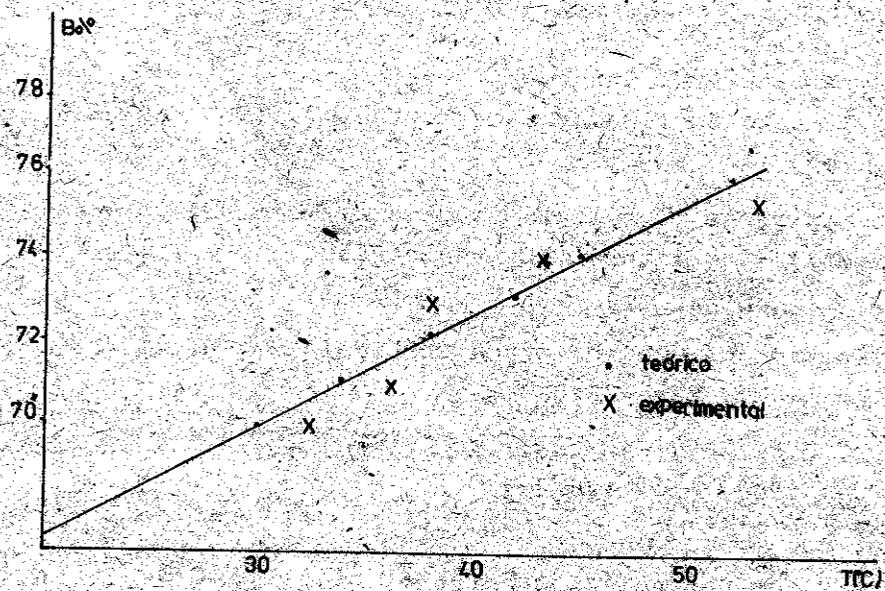


Tabla I
Resultados de la simulación matemática

% sacarosa	Topt (°C)	T (°C)	c/c ₀
77,6	56	19	1,26
76,4	52	18	1,23
74,2	45	15	1,17
73,1	42	13	1,14
72,0	38	12	1,12
71,0	34	11	1,11
70,0	30	10	1,09

BIBLIOGRAFÍA

1. Strickland
Constable, Crystallization AP; 1976.
2. Brice, J.
The growth of crystals from liquids. Amsterdam, north Holland.
3. Guerra, J.
I.S.J. Abril, 1984.

4. Valdés, A.; F. Cambeiro y O. Gómez
Cuba Azúcar, enero/mayo 1974.
5. Atkins, P.C. y A.W. Strong
Proc. Aust. Soc. Sugar Cane Technol., 1981, 39-43.
6. Hönig, P.
Principios de Tecnología Azucarera, Tomo II, cap. 4, Ed. Compañía Editorial Continental, España, 1969.
7. Sohnel, O. y M. Krysta
Collection of Czechoslovak Chemical Communications, Vol. 39,
No. 9, 1974, pág. 2520-31.
8. Charles, D.F.
I.S.J. 1960, pág. 126-32.
9. Smythe, D.
Australian Journal of Chemistry, 1967, Vol. 20, No. 6, pág. 1087.
10. Kucharenko, J.A.
Planter Sugar Infr. 53, No. 19, 54, No. 4.

Programas de computación para el estudio de celdas solares de silicio mediante mediciones de I-V

Andrés Martel Arbelo, Facultad de Física, Universidad de La Habana

RESUMEN

En este trabajo se presentan dos programas para microcomputadora capaces de:

- Extraer los parámetros eléctricos y de explotación de una celda solar de silicio a partir de la característica I-V iluminada.
- Predecir el comportamiento de la celda cuando los parámetros eléctricos de la misma varían.

Se describen y argumentan los algoritmos utilizados.

ABSTRACT

Two microcomputer programs are presented which are able to:

- Find the electric and exploitation parameters of a silicon solar cell from the illuminated I-V characteristics.
- Predict the silicon solar cell behaviour for variable electric parameters.

The algorithms used are described and discussed.

I. INTRODUCCIÓN

El uso del circuito equivalente con parámetros concentrados ha demostrado brindar un modelo eficiente para el análisis y modelación de las celdas solares de silicio que trabajan sin concentración. El empleo de microcomputadoras en la tarea de elaboración de las mediciones de I-V ofrece nuevas posibilidades de exactitud, rapidez y complejidad de los métodos utilizados. Los programas objeto de este trabajo combinan estos aspectos para lograr sus objetivos.

II. PARTE TEÓRICA

Como es conocido, la característica I-V iluminada de una celda solar de silicio en el modelo de parámetros concentrados y doble exponencial viene dada en su forma general por la ecuación (1):

$$I = I_L - (V + IR_s) / R_p - I_r (\exp(q(V + IR_s) / N_r kT) - 1) - I_d (\exp(q(V + IR_s) / N_d kT) - 1) \quad (1)$$

Si tomamos $N_d=1$, entonces I_d es la corriente de difusión de Shockley [1] y para $N_r=2$, I_r será la corriente de recombinación [2], [3].

Varios métodos [4], [5], [6] han sido propuestos para calcular todos o algunos de los parámetros de la ecuación (1). El primero de nuestros programas, que nombraremos analizador, para lograr este fin combina algunas de las ideas de estos autores con nuestra experiencia en este campo. El segundo programa, que denominaremos sintetizador, resuelve la ecuación (1) para valores escogidos de los parámetros.

DESCRIPCIÓN DE LOS PROGRAMAS

Programa analizador

Para $N_d=1$ y $N_r=2$ debemos determinar cinco parámetros: I_L , I_r , I_d , R_s , R_p . Para ello son necesarias cinco ecuaciones independientes. Tres de estas pueden ser [6]:

$$\left. \begin{aligned} R_p &= 1 / [1 / (R_{po} - R_s) - q / 2kT I_r \exp(q I_{cc} R_s / 2kT) - q / kT I_d \exp(q I_{cc} R_s / kT)] \\ R_s &= R_{so} - 1 / [1 / R_p + q kT I_r \exp(q V_{ca} / 2kT) + q kT I_d \exp(q V_{ca} / kT)] \\ I_L &= V_{ca} / R_p + I_r (\exp(q V_{ca} / 2kT) - 1) + I_d (\exp(q V_{ca} / kT) - 1) \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

$$\text{Donde } R_{so} = -(dV/dI) \text{ para } I=0 \text{ y } R_{po} = -(dV/dI) \text{ para } V=0 \quad (3)$$

El programa analizador resuelve estas ecuaciones por métodos de iteración. En calidad de valores de partida hemos tomado:

$$\begin{aligned} R_p &= R_{po} \\ R_s &= R_{so} \\ I_L &= I_{cc} \end{aligned} \quad (4)$$

En el proceso de puesta a punto del programa resultó que la ecuación más ventajosa en el sentido de rapidez y exactitud fue la ecuación:

$$I_d = \{ [(R_p + R_s) I_{cc} - V_{ca}] / R_p - I_r [\exp(q V_{ca} / 2kT) - \exp(q I_{cc} R_s / 2kT)] \} / [\exp(q V_{ca} / kT) - \exp(q I_{cc} R_s / kT)] \quad (5)$$

Esto se debe a que el valor de partida para I_d se puede obtener más exacta y establemente a partir del punto de corto circuito y la aproximación de Shockley:

$$I_d = I_{cc}/\text{EXP}(qV_{ca}/kT)$$

(6)

Por estas razones, la ecuación (5) puede ser incluida en el sistema iterativo (2). En calidad de quinta ecuación resulta ventajoso calcular el cero con respecto a I_r de la ecuación

$$I(I_r, V_m) - I_m = 0$$

(7)

Esta ecuación resulta ventajosa debido a que en el punto óptimo las corrientes de difusión y recombinación suelen ser del mismo orden. Por ello la influencia de I_r es fuerte y su determinación más precisa.

De lo dicho se ve que la determinación de los parámetros de la celda se realiza a partir de los tres puntos más singulares de la característica I-V;

- corto circuito -
- circuito abierto -
- punto óptimo -

Algoritmo de cálculo

Los elementos principales del algoritmo de cálculo son:

- Entrada de valores y condiciones.
- Determinación del punto óptimo. Aquí mediante la inspección del producto IV se determinan I_m , V_m y P_m .
- Determinación de I_{cc} y R_{po} . Este proceso se realiza disminuyendo el voltaje a partir de V_m y escogiendo la recta que tiene el menor *error* relativo del intercepto (I_{cc}) y de la pendiente (R_{po}). En calidad de *error* se toma el intervalo de confianza correspondiente.
- Determinación de V_{ca} y R_{so} . Se efectúa de modo similar al anterior.
- Se realiza un número fijo de iteraciones y cada vez se resuelve la ecuación (7) y se determina Q que es el valor medio cuadrático de la distancia entre las características I-V teórica y experimental.
- Se escoge el conjunto de parámetros que corresponde al menor valor de Q .
- Se supone $R_s=0$ y $R_p=\infty$ y se calculan las corrientes y características de la juntura ideal.
- Se calculan las magnitudes de salida y se construyen los gráficos.

Con esta organización se logra que el programa corra para diferentes exactitudes de los datos experimentales. La calidad del ajuste se juzga por el valor de Q y dependerá de la exactitud mencionada. El programa brinda como salida la siguiente información:

- Gráficos de I-V experimental, teórico e ideal.
- Corriente de corto circuito.
- Voltaje de circuito abierto.
- Corriente, voltaje y potencia en el punto óptimo.
- Factor de llenado.

- Eficiencia.
- Densidad de fotocorriente.
- Densidad de corriente de difusión.
- Densidad de corriente de recombinación.
- Resistencia serie.
- Resistencia paralelo.

Programa sintetizador

Este programa construye familias de curvas de I_{cc} , V_{ca} , I_m , V_m , P_m y F_f tomando como variable independiente y parámetro a dos cualesquiera de las características del circuito equivalente a saber; I_l , I_r , I_d , N_r , N_d , R_s , R_p . Para ello se basa en la solución de la ecuación (1) con respecto a la corriente.

Algoritmo de cálculo

Los elementos principales del algoritmo son:

- Entrada de valores y condiciones.
- Determinación del conjunto de valores de la variable independiente y del parámetro para el cual se debe resolver la ecuación (1).
- Determinación de I_{cc} y V_{ca} .
- Solución de la ecuación (1) para el conjunto anteriormente señalado. Esta solución se realiza por el método de partición del intervalo. En cada caso se calcula I_m , V_m y P_m .
- Cálculo de las magnitudes de salida.
- Construcción de las tablas y gráficos de salida.

La salida se realiza en forma de tablas y/o gráficos en el monitor o ploteador.

III. RESULTADOS

Programa analizador

En la tabla y figura 1 se muestra un ejemplo de corrida para una celda de silicio monocristalino (IPO27TI) obtenida por técnicas de capa gruesa. Los puntos experimentales fueron medidos gráficamente a partir de una curva I-V obtenida en un registrador X-Y. En ambas se ve que el ajuste es bueno ($Q \approx 0.005$) y que la mayor divergencia la aportan los puntos cercanos al circuito abierto. Esto puede deberse a que en esta región la característica I-V es muy abrupta y la determinación del voltaje por el método gráfico se hace menos precisa. También existe la tendencia al empeoramiento del ajuste para bajas corrientes [7]. Los valores de Q obtenidos por el programa para diferentes celdas y mediciones oscilan entre 0.01 y 0.005 en dependencia, al parecer, de la exactitud de los datos.

Programa sintetizador

En la tabla 2 y las figuras 3, 4, 5, 6 y 7 se muestra la corrida para la celda mencionada en el caso en que I_l actúa variable independiente y R_s como parámetro. Para R_s se han escogido los valores 0.13 y 1 Ohm. El primer valor corresponde al calculado por el programa analizador. También los valores escogidos para el resto de los parámetros coinciden con los calculados por el programa analizador. Los niveles de I_l corresponden aproximadamente a 0.2-2 Soles para esta celda. Esta situación simula el comportamiento de las celdas con dos contactos diferentes (R_s) en condiciones de iluminación variable. En los gráficos se puede apreciar el comportamiento de la celda en estas condiciones.

Las ondulaciones que en todos los casos aparecen en los gráficos de I_m y V_m no obedecen a causas físicas sino que son producto de la inexactitud en la determinación de estas magnitudes.

IV. CONCLUSIONES

- El Programa analizador permite calcular las características eléctricas y de explotación de una celda solar a partir de las mediciones de I-V bajo iluminación.
- El programa sintetizador permite estudiar y simular el comportamiento de la celda para distintas situaciones de variación de los parámetros de la misma.

Símbolos utilizados

- Ff - Factor de llenado
- I - Corriente
- I_{cc} - Corriente de corto circuito
- I_d - Corriente de difusión
- I_l - Fotocorriente
- I_r - Corriente de recombinación
- k - Constante de Boltzman
- N_d - Factor de difusión
- N_r - Factor de recombinación
- P_m - Potencia óptima
- q - Carga de electrón
- R_p - Resistencia paralelo
- R_s - Resistencia serie
- T - Temperatura
- V - Voltaje
- V_{ca} - Voltaje de circuito abierto
- V_m - Voltaje óptimo

MEDICIONES DE I-V ILUMINADA EN CUARTO CUADRANTE

Celda IPO27TI

Parámetros reales calculados

Corriente de corto circuito	$I_{cc} = 0.545E+00 + - 0.819E-03 A$
Voltaje de circuito abierto	$V_{ca} = 0.586 + - 0.007 V$
Corriente óptima	$I_{op} = 0.505E+00 + - 1.38E-02 A$
Voltaje óptimo	$V_{op} = 0.475 + --0.013 V$
Potencia óptima	$P_{op} = 0.240E+00 + -0.234E-03 W$
Factor de llenado	$FF = 0.750 + - 0.011$
Eficiencia	$Ef = 12.0 + - 0.012 \%$
Densidad de fotocorriente	$J_1 = 2.73E-02 + -2.73E-05 A \text{ por cm cuadr.}$
Densidad de I de recombinación	$J_r = 1.03E-07 + -1.03E-10 A \text{ por cm cuadr.}$
Densidad de corriente de dif.	$J_d = 2.99E-12 + -2.99E-15 A \text{ por cm cuadr.}$
Resistencia serie	$R_s = 0.040 + -0.0000 Ohm$
Resistencia paralelo	$R_p = 1.93E+02 + -0.19E+00 Ohm$

Parámetros ideales calculados

Corriente de corto circuito	$I_{cc} = 0.545E +00 + - 0.819E-03 A$
Voltaje de circuito abierto	$V_{ca} = 0.589 + - 0.000 V$
Factor de llenado	$FF = 0.783 + - 0.003$
Corriente óptima	$I_{op} = 0.503E +00 + - 1.35E-02 A$
Voltaje óptimo	$V_{op} = 0.500 + - 0.013 V$
Potencia óptima	$P_{op} = 0.251E+00 + - 0.501E-03 W$
Eficiencia	$Ef = 12.6 + - 0.025 \%$

$Q = 6.85673E-03$

La mejor aproximación fue la N9.5
Fallo del 30. % de las aproximaciones

Valores suministrados para el cálculo

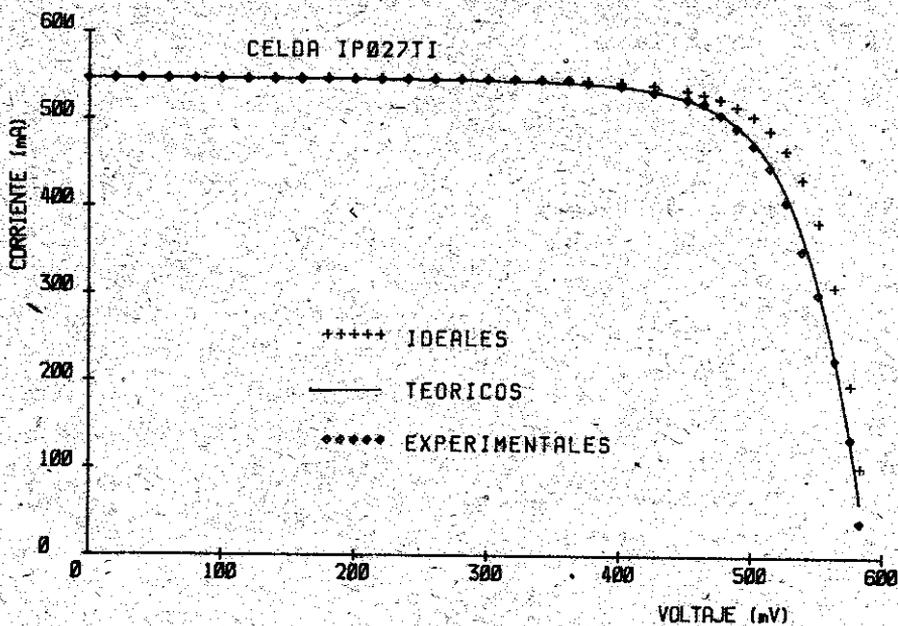
Area de dispositivo	$S = 20 \text{ cm cuadr.}$
Radiación incidente	$R = 100 \text{ mW/cm cuadr.}$
Temperatura del experimento	$T = 28 \text{ grados CELSIUS}$

88/04/06

14:03:09

TABLA 1. Programa analizador: información de salida.

Figura 1. Programa analizador: gráficos de salida



Parámetros utilizados

Corriente de recombinación $I_r = 1.00E-03$ mA
 Corriente de difusión $I_d = 1.00E-07$ mA
 Factor de recombinación $F_r = 2.00$
 Factor de difusión $F_d = 1.00$
 Resistencia paralelo $R_p = 4.00E+01$ Ohm

$R_s = .1 - 1$ Ohm
 $I_l = 100 - 1000$ mA

TABLA DE VALORES

I _l mA	I _{cc} mA	R _s = .1 Ohm				
		V _{ca} mV	I _m mA	V _m mV	P _m mW	F _f %
1.00E+02	100	524	83	424	35.3	67.5
1.50E+02	150	538	127	446	56.5	70.2
2.00E+02	200	547	175	444	78.0	71.5
2.50E+02	249	554	225	442	99.4	72.0
3.00E+02	299	559	270	447	120.7	72.1
3.50E+02	349	564	314	452	142.0	72.2
4.00E+02	399	568	357	456	162.8	71.9
4.50E+02	449	571	409	449	183.6	71.7
5.00E+02	499	574	451	452	204.0	71.3
5.50E+02	549	577	504	444	224.0	70.8
6.00E+02	599	579	548	445	243.9	70.4
6.50E+02	648	581	586	450	263.4	69.9
7.00E+02	698	583	643	440	282.6	69.4
7.50E+02	748	585	683	442	301.7	68.9
8.00E+02	798	587	729	439	320.2	68.3
8.50E+02	848	589	778	435	338.4	67.8
9.00E+02	898	590	820	435	356.4	67.2
9.50E+02	948	592	871	429	373.8	66.6
1.00E+03	998	593	908	431	391.0	66.1

TABLA DE VALORES

I _l mA	I _{cc} mA	R _s = 1 Ohm				
		V _{ca} mV	I _m mA	V _m mV	P _m mW	F _f %
1.00E+02	98	524	81	364	29.4	57.6
1.50E+02	146	538	119	356	42.5	54.0
2.00E+02	195	547	157	335	52.5	49.2
2.50E+02	244	554	192	312	60.0	44.4
3.00E+02	293	559	212	307	65.3	39.9
3.50E+02	341	564	229	302	69.1	36.0
4.00E+02	388	568	244	295	72.0	32.7
4.50E+02	433	571	258	288	74.2	30.0
5.00E+02	471	574	260	292	76.0	28.1
5.50E+02	499	577	263	295	77.5	26.9
6.00E+02	518	579	265	297	78.8	26.3
6.50E+02	530	581	277	289	79.9	25.9
7.00E+02	540	583	278	291	80.9	25.7
7.50E+02	547	585	280	293	81.8	25.5
8.00E+02	553	587	280	295	82.6	25.4
8.50E+02	558	589	282	295	83.4	25.4
9.00E+02	563	590	283	297	84.0	25.3
9.50E+02	566	592	287	295	84.7	25.2
1.00E+03	570	593	286	298	85.2	25.2

TABLA 2. Programa sintetizador: información de salida

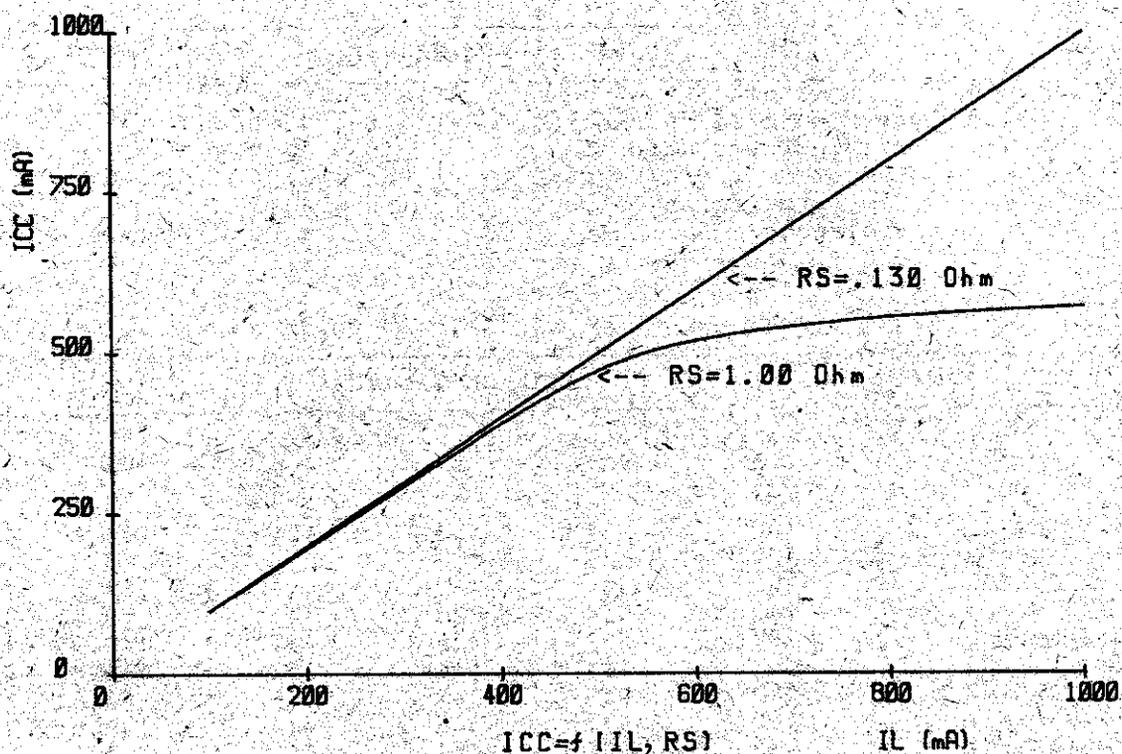


Figura 2. Programa sintetizador: variación de la corriente de cortocircuito con la iluminación para diferentes contactos

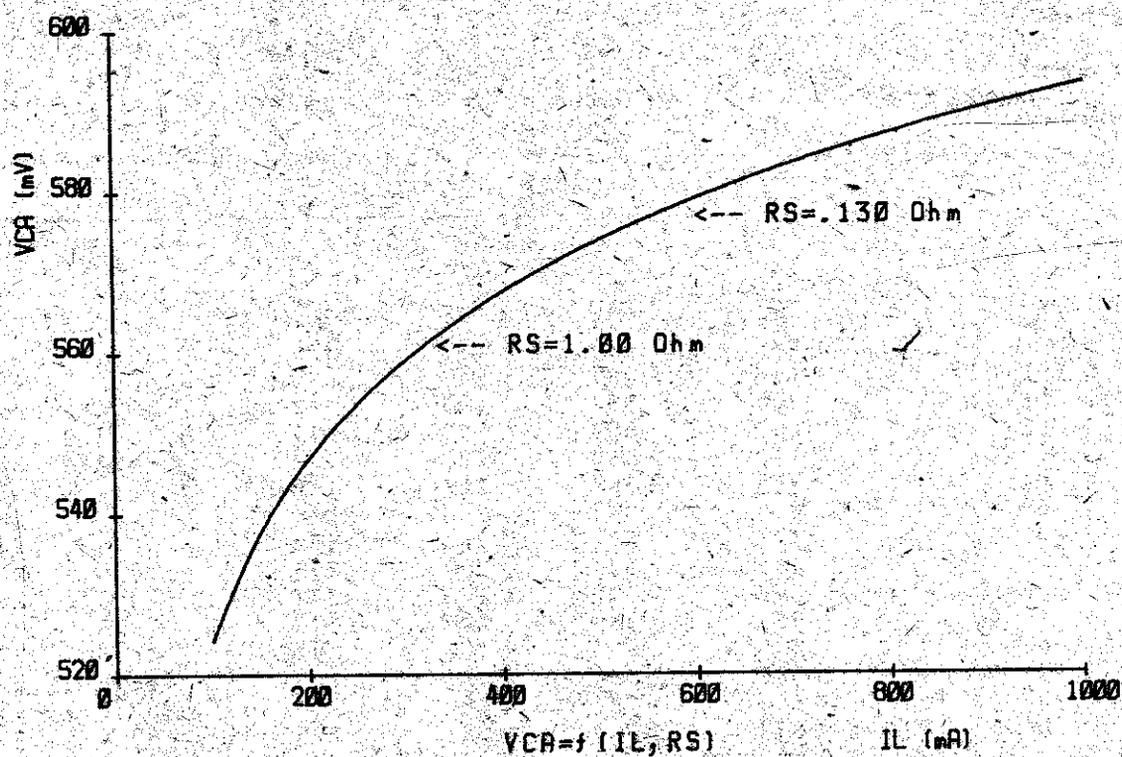


Figura 3. Programa sintetizador: variación del voltaje de circuito abierto con la iluminación para diferentes contactos

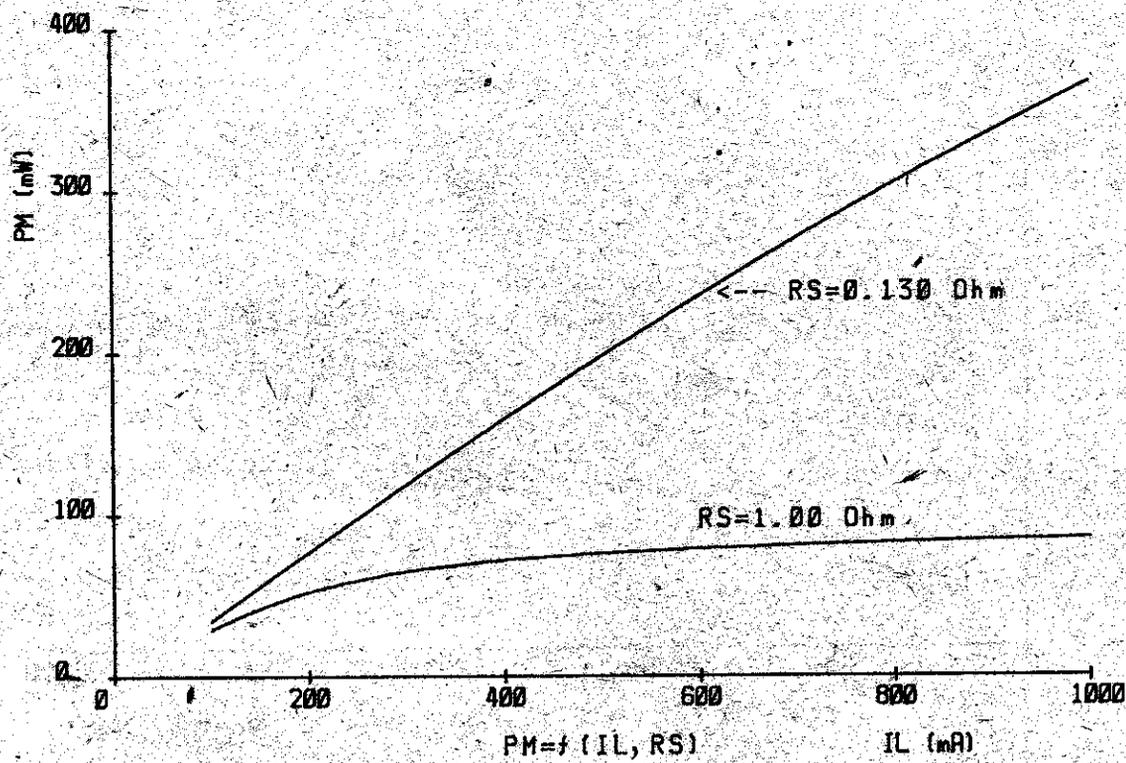


Figura 4. Programa sintetizador: variación de la potencia óptima con la iluminación para diferentes contactos

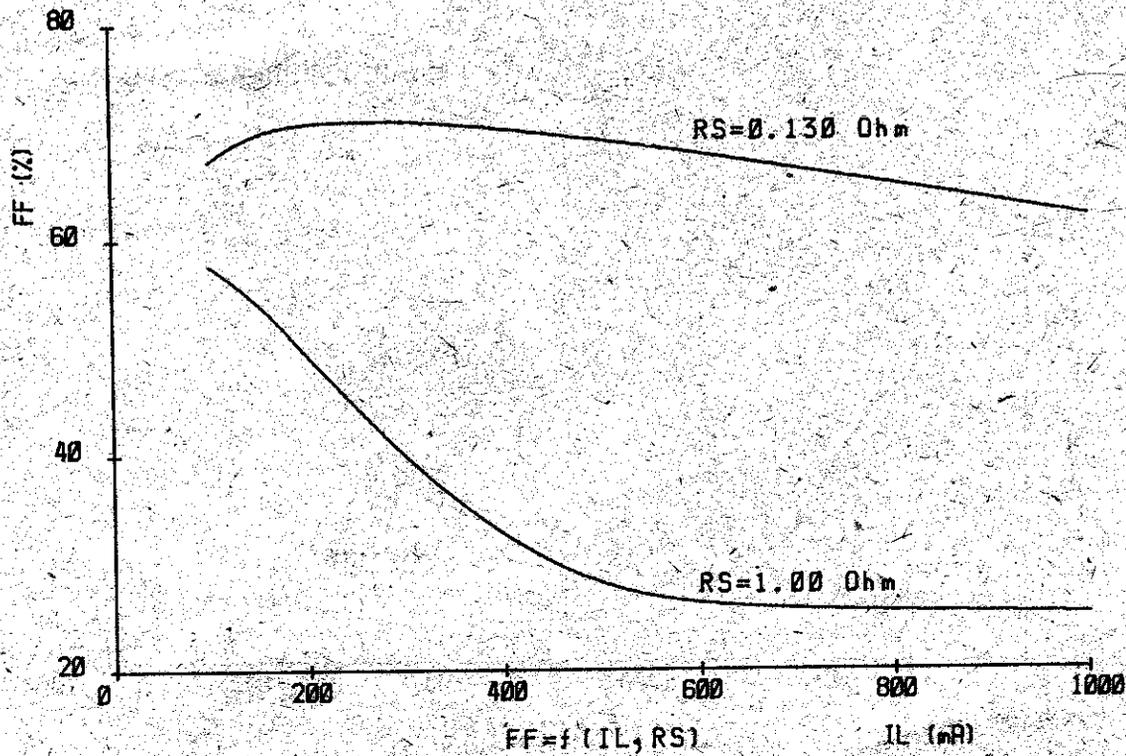


Figura 5. Programa sintetizador: variación del factor de llenado con la iluminación para diferentes contactos

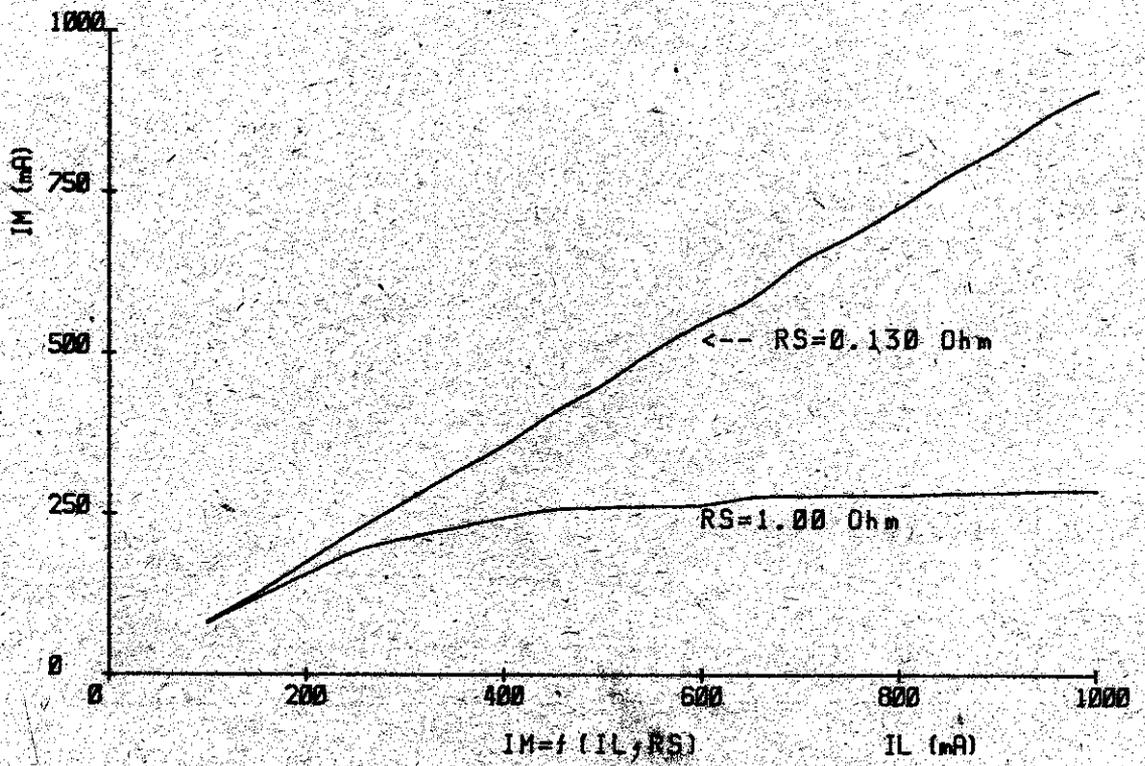


Figura 6. Programa sintetizador: variación de la corriente óptima con la iluminación para diferentes contactos

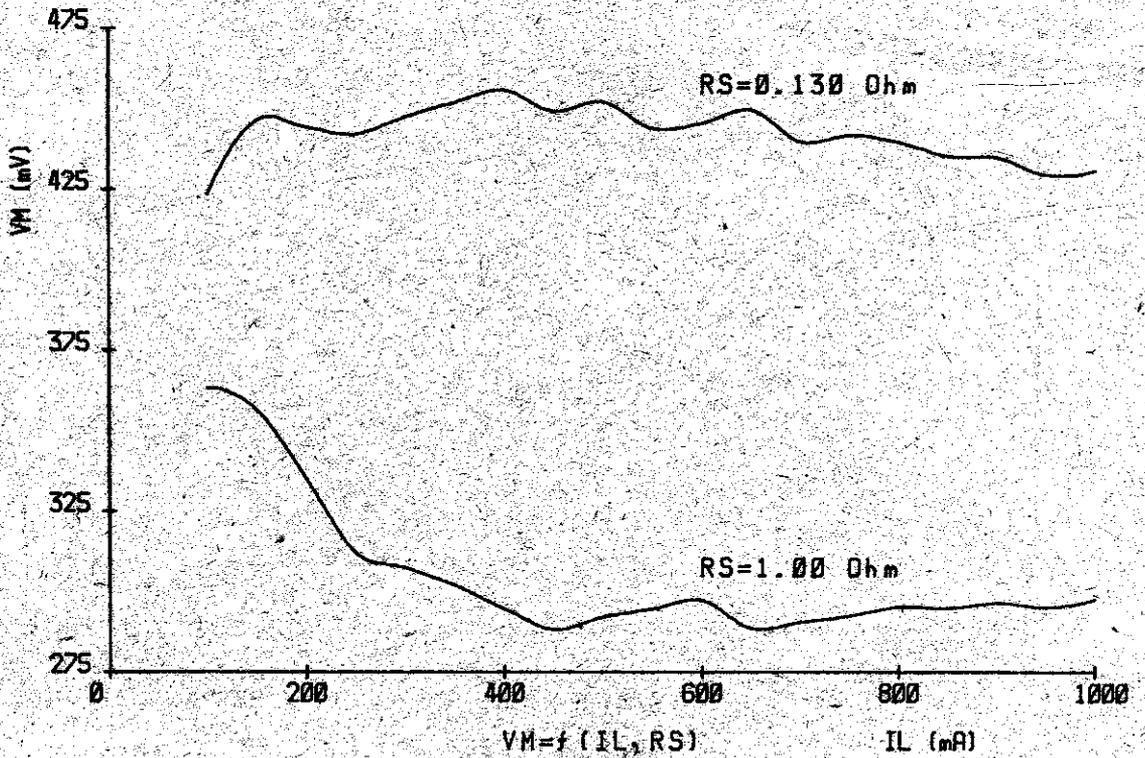


Figura 7. Programa sintetizador: variación del voltaje óptimo con la iluminación para diferentes contactos

BIBLIOGRAFIA

- [1] Shockley, W.
Bell Syst. Tech. J 23, pp 435-439 (1949).
- [2] Sah, C.; R.N. Noyce and W. Shockley
Proc. 45 pp, 1228-1243 (1957).
- [3] Henry, C.H.; R.A. Logan and P.R. Merritt
J. Appl. Phys., Vol. 49, pp. 3330-3342 (1978).
- [4] Martel, A.; S. Aguilera; N. Safronova and M. Garcia
Cryst. Res. Tech., Vol. 20, pp. 1261-1269 (1985).
- [5] Polman, A.; W.G. Van Sark, W. Sinke W. and F.W. Saris
Solar Cells, Vol. 17, pp. 241-2251 (1986).
- [6] Charles, J.P.; G. Bordure; A. Khoury and P. Mialhe
J. Phys D. Appl. Phys. 18, pp. 2261-2268 (1985).
- [7] Charles, J.P.; I. Mekkakoi and G. Bordure
Solid State Electronic, Vol. 28, No. 8, pp. 807-820 (1985).

Estructura interna e interacción de los solitones

Jorge A. González, Departamento de Física, Universidad de Camagüey

RESUMEN

Se obtiene el potencial de interacción solitón-antisolitón (Teoría ϕ^4). Se demuestra que la estructura interna del solitón se comporta como un resorte relativista elástico.

ABSTRACT

The soliton-antisoliton interaction potential is obtained (ϕ^4 theory). It is proved that the internal structure of the soliton behaves as a relativistic string.

1. Un buen resumen temático sobre la aplicación de los solitones en la teoría del campo se puede encontrar en los reportes de Makhankov [1,2].

En los trabajos del autor de la presente comunicación [3,5] se investigó la ecuación general no lineal,

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} - R' \frac{\partial \phi}{\partial t} + G(\phi) = 0 \quad (1)$$

demostrándose las condiciones necesarias para la existencia de ondas solitarias. Se estudiaron además, todos los tipos posibles de estas ondas.

Para el caso particular

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} - R' \frac{\partial \phi}{\partial t} + \alpha \phi + \beta \phi^3 = h \quad (2)$$

que es la ecuación de la teoría del campo ϕ^4 forzada por un campo externo h y una fuerza disipativa, fueron obtenidas las soluciones exactas.

Como resultado de todos estos trabajos podemos decir lo siguiente:

Cuando $h = R' = 0$ la ecuación (2) tiene soluciones en forma de solitones y antisolitones libres moviéndose a velocidad constante V :

$$\phi = \pm \sqrt{-\frac{\alpha}{\beta}} \operatorname{th} \left[\sqrt{\frac{\alpha}{2}} \frac{x-Vt-X_0}{\sqrt{1-\frac{V^2}{c^2}}} \right], \quad (3)$$

Aquí th representa la tangente hiperbólica, x_0 es una constante arbitraria que determina la posición inicial del solitón.

Si la fuerza externa h es *conectada* (supongamos para mayor definición $h > 0$) el solitón será acelerado hacia la *derecha* (en dirección positiva del eje X) mientras que el antisolitón recibirá una aceleración en sentido contrario.

El comportamiento es newtoniano (relativista) [6].

Si $h \neq 0$ la ecuación (2) también posee una solución correspondiente a un estado estacionario ($V=0$)

$$\phi = \frac{2\sqrt{2P} (P - 3y^2)}{(P-y^2)e^k + P e^{-k} + 2y\sqrt{2P}} + y \quad (4)$$

donde

$$P = -\frac{\alpha}{\beta}, \quad K = \sqrt{\beta(P - 3y^2)} \cdot (X - X_0)$$

La magnitud y es una de las raíces $y_3 < y_1 < y_2$ de la ecuación cúbica $\alpha\phi + \beta\phi^3 = h$ en dependencia del signo de h . Si $h > 0$, $y=y_2$, si $h < 0$, $y=y_3$.

En lo adelante supondremos $h > 0$ ($h^2 < -\frac{4}{27} \frac{\alpha^3}{\beta}$).

La función (4) tiene la siguiente propiedad

$$\phi \rightarrow y_2, \quad x \rightarrow \pm \infty$$

Es decir, tiende al mismo valor en $+\infty$ y en $-\infty$ y posee un mínimo

$$\phi_{\min} = \sqrt{2(P - y_2^2)} - y_2$$

2. Un estudio detallado de la función (4) nos permite ver que es semejante a un estado ligado de un solitón y un antisolitón que se encuentran a cierta distancia uno del otro (ver [3-5]).

Comúnmente se define el punto de inflexión de la función $\phi(x)$ como el centro de masa del solitón, por lo que la distancia entre el solitón y el antisolitón estará dada por la separación geométrica de los dos puntos de inflexión de la función (4).

Esta distancia R se puede calcular como

$$R = \frac{2 \operatorname{arc} \operatorname{ch} \left(\frac{M}{Y_1 - Y_2} - N \right)}{\sqrt{\beta(P - 3Y_2^2)}} \quad (5)$$

donde

$$M = \frac{2\sqrt{2P} (P - 3Y_2^2)}{\sqrt{P(P - Y_2^2)}}, \quad N = \frac{2\sqrt{2P} Y_2}{P - Y_2^2} \quad (6)$$

Con el aumento de h disminuye la distancia entre el solitón y el anti-solitón y se hace más evidente su deformación (ver [3-5]).

La causa de la deformación es la interacción entre ellos.

Esta interacción tiene carácter de atracción.

Este estado estacionario de un solitón y un antisolitón puede existir debido a que, aparte de la fuerza de atracción entre ellos, está presente la fuerza externa h que sobre el solitón actúa hacia la *derecha* y sobre el antisolitón en sentido contrario.

La distancia R de la expresión (12) es la crítica para que se equilibren la fuerza de atracción de los solitones y la fuerza externa que los separa.

El sentido común nos dice que este estado de equilibrio es inestable y efectivamente: la inestabilidad de la solución (4) ha sido establecida por el autor [3-5].

Sin embargo, su existencia nos permite calcular la dependencia de la fuerza de atracción (que en el equilibrio coincide con h) respecto a la distancia que separa a los solitones.

La fórmula (5) nos da esta dependencia aunque de forma no explícita.

Un estudio de (5) nos ofrece la siguiente información: la fuerza de atracción h(R) posee un máximo en el origen

$$h(0) = \alpha \sqrt{-\frac{4\alpha}{27\beta}} \quad (7)$$

y decrece exponencial con la distancia

$$h(R) \sim e^{-\sqrt{\alpha} R} \quad (8)$$

3. Ahora utilizaremos a (4) para investigar la estructura interna del solitón.

Definamos primeramente el tamaño del solitón para poder hablar de estructura interna.

La función (3) tiende exponencialmente en $+\infty$ y en $-\infty$ a los valores del vacío ($\pm \sqrt{-\frac{\alpha}{\beta}}$) en los cuales la energía es cero.

Estos valores se alcanzan más rápidamente entre mayor sea el valor de $\sqrt{2\alpha}$ (este es el coeficiente delante de la X en el exponente). Por eso usualmente se define como radio del solitón el valor

$$R_s = \frac{1}{\sqrt{2\alpha}} \quad (9)$$

El solitón y el antisolitón que están involucrados en el estado ligado (4), sufren una deformación debido al par de fuerzas que actúan sobre ellos en sentidos contrarios.

El nuevo radio del solitón deformado será

$$R_{s \text{ def}} = \frac{1}{\sqrt{\beta(P-3y_2^2)}} \quad (10)$$

Para una fuerza externa h pequeña ($h \ll \alpha \sqrt{-\frac{\alpha}{\beta}}$) tenemos

$$R_{s \text{ def}} \approx \frac{1}{\sqrt{2\alpha}} \left[1 + \frac{3h}{4\alpha \sqrt{-\frac{\alpha}{\beta}}} \right] \quad (11)$$

Lo que quiere decir que la deformación respecto al estado inicial de un solitón no perturbado (3) es

$$\Delta R = \frac{3}{4} \sqrt{-\frac{\beta}{2}} \frac{h}{\alpha^2} \quad (12)$$

¡La estructura interna del solitón resulta ser elástica!

(La deformación es proporcional a la fuerza externa).

Esto conlleva a que la estructura interna del solitón se comporte dinámicamente como un resorte relativista.

Los experimentos numéricos y análisis perturbativos realizados por Makhankov [1,2] para estudiar la estabilidad del solitón (3) confirman la existencia de oscilaciones del radio del solitón como reacción a pequeñas perturbaciones.

La fórmula exacta (10) nos permite conocer la deformación del radio del solitón para campos externos muy intensos.

Puede considerarse que este resorte es el que mantiene unidos a los quarks que forman el solitón.

BIBLIOGRAFIA

1. Makhan'kov, V.G.
Phys. Rep. 35, pag. 1 (1978).
2. Makhan'kov, V.G.
Fizika elementarnykh chástits i atomnogo yadra-Dubna. Vol. 14, No. 1,
pag. 1 (1983).
3. González, J.A.
ICTP, Trieste, Int. Report. IC/86/79 (1986).
4. González, J.A. y J.A. Holyst
ICTP, Trieste, Int. Report IC/86/122 (1986).
5. González, J.A. y J.A. Holyst
Physical Review B Vol. 35 No. 7, pag. 3643 (1987).
6. Dash, P.C.
Phys. Lett. 109 A, pag. 307 (1985).

Estructura interna e interacción de los solitones

Jorge A. González, Departamento de Física, Universidad de Camagüey

RESUMEN

Se obtiene el potencial de interacción solitón-antisolitón (Teoría φ^4). Se demuestra que la estructura interna del solitón se comporta como un resorte relativista elástico.

ABSTRACT

The soliton-antisoliton interaction potential is obtained (φ^4 theory). It is proved that the internal structure of the soliton behaves as a relativistic string.

1. Un buen resumen temático sobre la aplicación de los solitones en la teoría del campo se puede encontrar en los reportes de Makhankov [1,2].

En los trabajos del autor de la presente comunicación [3,5] se investigó la ecuación general no lineal,

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} - R' \frac{\partial \varphi}{\partial t} + G(\varphi) = 0 \quad (1)$$

demostrándose las condiciones necesarias para la existencia de ondas solitarias. Se estudiaron además, todos los tipos posibles de estas ondas.

Para el caso particular

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} - R' \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \alpha \varphi + \beta \varphi^3 = h \quad (2)$$

que es la ecuación de la teoría del campo ϕ^4 forzada por un campo externo h y una fuerza disipativa, fueron obtenidas las soluciones exactas.

Como resultado de todos estos trabajos podemos decir lo siguiente:

Cuando $h = R' = 0$ la ecuación (2) tiene soluciones en forma de solitones y antisolitones libres moviéndose a velocidad constante V :

$$\phi = \pm \sqrt{-\frac{\alpha}{\beta}} \operatorname{th} \left[\sqrt{\frac{\alpha}{2}} \frac{x-Vt-X_0}{\sqrt{1-\frac{V^2}{c^2}}} \right], \quad (3)$$

Aquí th representa la tangente hiperbólica, x_0 es una constante arbitraria que determina la posición inicial del solitón.

Si la fuerza externa h es *conectada* (supongamos para mayor definición $h > 0$) el solitón será acelerado hacia la *derecha* (en dirección positiva del eje x) mientras que el antisolitón recibirá una aceleración en sentido contrario.

El comportamiento es newtoniano (relativista) [6].

Si $h \neq 0$ la ecuación (2) también posee una solución correspondiente a un estado estacionario ($V=0$)

$$\phi = \frac{2\sqrt{2P} (P - 3y^2)}{(P-y^2)e^k + P e^{-k} + 2y \sqrt{2P}} + y \quad (4)$$

donde

$$P = -\frac{\alpha}{\beta}, \quad K = \sqrt{\beta(P - 3y^2)} \cdot (X - X_0)$$

La magnitud y es una de las raíces $y_3 < y_1 < y_2$ de la ecuación cúbica $\alpha\phi + \beta\phi^3 = h$ en dependencia del signo de h . Si $h > 0$, $y=y_2$, si $h < 0$, $y=y_3$.

En lo adelante supondremos $h > 0$ ($h^2 < -\frac{4}{27} \frac{\alpha^3}{\beta}$).

La función (4) tiene la siguiente propiedad

$$\phi \rightarrow y_2, \quad x \rightarrow \pm \infty$$

Es decir, tiende al mismo valor en $+\infty$ y en $-\infty$ y posee un mínimo

$$\phi_{\min} = \sqrt{2(P - y_2^2)} - y_2$$

2. Un estudio detallado de la función (4) nos permite ver que es semejante a un estado ligado de un solitón y un antisolitón que se encuentran a cierta distancia uno del otro (ver [3-5]).

Comúnmente se define el punto de inflexión de la función $\phi(x)$ como el centro de masa del solitón, por lo que la distancia entre el solitón y el antisolitón estará dada por la separación geométrica de los dos puntos de inflexión de la función (4).

Esta distancia R se puede calcular como

$$R = \frac{2 \operatorname{arc} \operatorname{ch} \left(\frac{M}{y_1 - y_2} - N \right)}{\sqrt{\beta(P - 3y_2^2)}} \quad (5)$$

donde

$$M = \frac{2\sqrt{2P}(P - 3y_2^2)}{\sqrt{P(P - y_2^2)}}, \quad N = \frac{2\sqrt{2P}y_2}{P - y_2^2} \quad (6)$$

Con el aumento de h disminuye la distancia entre el solitón y el anti-solitón y se hace más evidente su deformación (ver [3-5]).

La causa de la deformación es la interacción entre ellos.

Esta interacción tiene carácter de atracción.

Este estado estacionario de un solitón y un antisolitón puede existir debido a que, aparte de la fuerza de atracción entre ellos, está presente la fuerza externa h que sobre el solitón actúa hacia la derecha y sobre el antisolitón en sentido contrario.

La distancia R de la expresión (12) es la crítica para que se equilibren la fuerza de atracción de los solitones y la fuerza externa que los separa.

El sentido común nos dice que este estado de equilibrio es inestable y efectivamente: la inestabilidad de la solución (4) ha sido establecida por el autor [3-5].

Sin embargo, su existencia nos permite calcular la dependencia de la fuerza de atracción (que en el equilibrio coincide con h) respecto a la distancia que separa a los solitones.

La fórmula (5) nos da esta dependencia aunque de forma no explícita.

Un estudio de (5) nos ofrece la siguiente información: la fuerza de atracción h(R) posee un máximo en el origen

$$h(0) = \alpha \sqrt{-\frac{4\alpha}{27\beta}} \quad (7)$$

y decrece exponencial con la distancia

$$h(R) \sim e^{-\sqrt{\alpha} R} \quad (8)$$

3. Ahora utilizaremos a (4) para investigar la estructura interna del solitón.

Definamos primeramente el tamaño del solitón para poder hablar de estructura interna.

La función (3) tiende exponencialmente en $+\infty$ y en $-\infty$ a los valores del vacío ($\pm \sqrt{-\frac{\alpha}{\beta}}$) en los cuales la energía es cero.

Estos valores se alcanzan más rápidamente entre mayor sea el valor de $\sqrt{2\alpha}$ (este es el coeficiente delante de la X en el exponente). Por eso usualmente se define como radio del solitón el valor

$$R_s = \frac{1}{\sqrt{2\alpha}} \quad (9)$$

El solitón y el antisolitón que están involucrados en el estado ligado (4), sufren una deformación debido al par de fuerzas que actúan sobre ellos en sentidos contrarios.

El nuevo radio del solitón deformado será

$$R_{s \text{ def}} = \frac{1}{\sqrt{\beta(P-3Y^2)}} \quad (10)$$

Para una fuerza externa h pequeña ($h \ll \alpha \sqrt{-\frac{\alpha}{\beta}}$) tenemos

$$R_{s \text{ def}} \approx \frac{1}{\sqrt{2\alpha}} \left(1 + \frac{3h}{4\alpha \sqrt{-\frac{\alpha}{\beta}}} \right) \quad (11)$$

Lo que quiere decir que la deformación respecto al estado inicial de un solitón no perturbado (3) es

$$\Delta R = \frac{3}{4} \sqrt{-\frac{\beta}{2}} \frac{h}{\alpha^2} \quad (12)$$

¡La estructura interna del solitón resulta ser elástica!

(La deformación es proporcional a la fuerza externa).

Esto conlleva a que la estructura interna del solitón se comporte dinámicamente como un resorte relativista.

Los experimentos numéricos y análisis perturbativos realizados por Makhankov [1,2] para estudiar la estabilidad del solitón (3) confirman la existencia de oscilaciones del radio del solitón como reacción a pequeñas perturbaciones.

La fórmula exacta (10) nos permite conocer la deformación del radio del solitón para campos externos muy intensos.

Puede considerarse que este resorte es el que mantiene unidos a los *quarks* que forman el solitón.

BIBLIOGRAFIA

1. Makhankov, V.G.
Phys. Rep. 35, pág. 1 (1978).
2. Makhankov, V.G.
Fizika elementarnykh chástits i atomnogo yadra-Dubna. Vol. 14, No. 1,
pág. 1 (1983).
3. González, J.A.
ICTP, Trieste, Int. Report IC/86/79 (1986).
4. González, J.A. y J.A. Holyst
ICTP, Trieste, Int. Report IC/86/122 (1986).
5. González, J.A. y J.A. Holyst
Physical Review B Vol. 35 No. 7, pág. 3643 (1987).
6. Dash, P.C.
Phys. Lett. 109 A, pág. 307 (1985).