

Efecto polarónico en pozo cuántico utilizando el Hamiltoniano tridimensional de Fröhlich

R. Riera, F. Comas y C. Trallero-Giner

Departamento de Física Teórica, Universidad de La Habana

RESUMEN

Se hacen los cálculos de la energía propia del electrón debido a la interacción con fonones ópticos polares de ondas largas (LO) a la temperatura $T=0K$, en una heteroestructura semiconductor del tipo de un pozo cuántico, utilizando el Hamiltoniano de interacción electrón-fonón tridimensional de Fröhlich. El pozo es considerado de forma rectangular con barreras potenciales infinitas en las inter-fases. Se utilizó además el modelo de la masa efectiva. Los cálculos se realizaron por dos vías: utilizando la aproximación de la conservación del momento (MCA), y el cálculo exacto. Por ambos métodos se obtiene como resultado que la masa del polarón y su energía de enlace es divergente, salvo que se considere el efecto de apantallamiento de la interacción.

ABSTRACT

Self-energy due to electron-LO phonon interaction is calculated for $T=0K$ in a quantum-well-type semiconductor heterostructure. The Fröhlich hamiltonian takes account of confined electrons in an infinite-depth quantum well and non-confined LO-phonons. Calculations, in the effective-mass approximation,

are made using the momentum-conservation approximation (MCA). Also exact calculations, without using the MCA, are made. The results for polaron mass and its binding energy diverge in both cases except when the screening effect is considered.

INTRODUCCIÓN

El estudio de las heteroestructuras semiconductoras ha adquirido una especial significación durante los últimos años después que el desarrollo de las técnicas de crecimiento (epitaxial por haces moleculares MBE) y de dopado (dopado modulado), brindaron la oportunidad de obtener capas semiconductoras muy delgadas con una elevada precisión en el control de sus espesores e impurezas, lo que ha permitido el surgimiento de una nueva categoría de los sistemas semiconductores: los pozos cuánticos (QW), los pozos cuánticos múltiples (MQW) y las superredes (SL), las cuales han dado lugar a un gran número de trabajos teóricos y experimentales relacionados con las propiedades de transporte [10,11], ópticos [12,13] y magnéticas.

En nuestros cálculos no se consideran los efectos de apantallamiento ni el confinamiento de los fonones ópticos (LO), tampoco se incluyen correcciones del factor de no parabolicidad de las bandas.

Se calcula la energía propia del electrón en su interacción con los fonones (LO) con el objetivo de calcular la masa y la energía de enlace del polarón, la cual puede ser expresada como sigue:

$$E_{\vec{k}N} = E_{\vec{k}N}^{(0)} (1 - \gamma') + \Delta$$

Donde $E_{\vec{k}N}$ es la energía cinética del electrón en interacción con la red, $E_{\vec{k}N}^{(0)}$ es la energía cinética del electrón en ausencia de interacción con la red, Δ es la energía de enlace y γ' es el incremento en la masa efectiva causada por la interacción del electrón con el campo de los fonones ópticos (LO).

TEORÍA GENERAL

La ecuación de masa efectiva para el electrón es:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \nabla^2 \psi + U(z) \psi = E \psi \quad (1)$$

con las condiciones de contorno

$U(z) = 0$ para $0 < z < d$ y $U(z) = \infty$ para $d \leq z \leq 0$ donde el eje z está en la dirección del crecimiento del pozo, m_e^* es la masa efectiva del electrón y $U(z)$ el potencial.

El estado de los electrones no perturbados $|N, \vec{k}\rangle$ se describe por la función de onda $\Psi(\vec{r}, N, \vec{k})$ y la energía $E^{(0)}_{\vec{k}, N}$ dada por:

$$\Psi(\vec{r}, N, \vec{k}) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \phi_N(z) \quad (2)$$

$$E^{(0)}_{N, \vec{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2 m_e^*} + E_{0z} N^2 \quad (3)$$

$$\phi_N(z) = \sqrt{\frac{2}{d}} \sin\left(\frac{N\pi z}{d}\right); \quad L = L_x L_y, \quad \vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$$

$$E_{0z} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e^* d^2}, \quad k_z = \frac{N\pi}{d}$$

siendo:

d el ancho del pozo.

L el área de las caras.

N un número entero que caracteriza la sub-banda del estado cuántico del electrón inicial.

La interacción entre el electrón y el fonón óptico (LO) se describe a través del hamiltoniano de Fröhlich $\hat{K}_{int}$.

$$\hat{K}_{int} = \sum_{\vec{q}} \left[c_{\vec{q}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \hat{b}_{\vec{q}} + c_{\vec{q}}^* e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} \hat{b}_{\vec{q}}^* \right] \quad (4)$$

$$c_{\vec{q}} = ie \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_{LO}}{e^* v}} \cdot \frac{1}{q} \quad \text{y} \quad \frac{1}{\epsilon^*} = \frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0}$$

Siendo:

i, la unidad imaginaria, e la carga del electrón, $\epsilon_0, \epsilon_\infty$ las constantes dieléctricas estática y de alta frecuencia, $v=Ld$ el volumen del pozo, $\vec{q}$ el momento del fonón óptico LO, $\hbar\omega_{LO}$ su energía.

La energía del estado intermedio producto de la interacción es:

$$E_{\vec{k}, N'} = \frac{\hbar^2 k^2}{2 m_e^*} + E_{0z} N'^2 \pm \hbar\omega_{LO} \quad (5)$$

N' es un número entero que caracteriza la sub-banda del estado cuántico final del electrón.

$|\vec{k}_\perp, N, \vec{q}\rangle$ representa el estado combinado del electrón y el fonón:

$$|N, \vec{k}, N_{\vec{q}}\rangle = |N\rangle |\vec{k}\rangle |N_{\vec{q}}\rangle \quad (6)$$

donde $|N\rangle |\vec{k}\rangle$ corresponde a la función de onda del electrón y $|N_{\vec{q}}\rangle$ es un estado fonónico, tal que:

$$\hat{b}_{\vec{q}} |N_{\vec{q}}\rangle = \sqrt{N_{\vec{q}}} |N_{\vec{q}} - 1\rangle, \quad \hat{b}_{\vec{q}}^+ |N_{\vec{q}}\rangle = \sqrt{N_{\vec{q}} + 1} |N_{\vec{q}} + 1\rangle \quad (7)$$

y $\hat{b}_{\vec{q}}^+$, $\hat{b}_{\vec{q}}$ son los operadores de creación y aniquilación de los fonones.

Usando estas propiedades, estudiamos los elementos matriciales:

$$\begin{aligned} \langle N', \vec{k}', N_{\vec{q}}' | e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \hat{b}_{\vec{q}} | N, \vec{k}, N_{\vec{q}} \rangle &= \sqrt{N_{\vec{q}}} \delta_{N', N_{\vec{q}} - 1} \langle N', \vec{k}' | e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} | N, \vec{k} \rangle \\ \langle N', \vec{k}', N_{\vec{q}}' | e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} \hat{b}_{\vec{q}}^+ | N, \vec{k}, N_{\vec{q}} \rangle &= \sqrt{N_{\vec{q}} + 1} \delta_{N', N_{\vec{q}} + 1} \langle N', \vec{k}' | e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} | N, \vec{k} \rangle \end{aligned} \quad (8)$$

pero

$$\langle N', \vec{k}' | e^{\pm i\vec{q} \cdot \vec{r}} | N, \vec{k} \rangle = \frac{1}{L_x L_y} \int e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}} \phi_{N'}^*(z) e^{\pm i\vec{q} \cdot \vec{r}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \phi_N(z) d^3r \quad (9)$$

En la ecuación (9) el signo menos representa la emisión de un fonón y el signo más la absorción. El elemento matricial puede ser expresado como:

$$\langle N', \vec{k}' | e^{\pm i\vec{q} \cdot \vec{r}} | N, \vec{k} \rangle = \delta_{\vec{k}', \vec{k} - \vec{q}_\perp} \int_0^d \sin \frac{N'\pi}{d} z \sin \frac{N\pi}{d} z e^{\pm i q_z z} dz \quad (10)$$

ya que $\vec{q} = (\vec{q}_\perp, q_z)$ y $\vec{q}_\perp$ contiene los componentes de $\vec{q}$ en el plano (x, y). Finalmente debemos obtener

$$I(\pm q_z) = \frac{2}{d} \int_0^d \sin \frac{N'\pi}{d} z \sin \frac{N\pi}{d} z e^{\pm q_z z} dz \quad (11)$$

cuya solución se obtiene resolviendo las siguientes integrales.

$$\begin{aligned} I(\pm q_z) = -\frac{1}{2d} \left\{ \int_0^d e^{i\left(\frac{N\pi}{d} + \frac{N'\pi}{d} \pm q_z\right)z} dz - \int_0^d e^{i\left(\frac{N\pi}{d} - \frac{N'\pi}{d} \pm q_z\right)z} dz \right. \\ \left. - \int_0^d e^{i\left(\frac{N'\pi}{d} - \frac{N\pi}{d} \pm q_z\right)z} dz + \int_0^d e^{-i\left(\frac{N\pi}{d} + \frac{N'\pi}{d} \pm q_z\right)z} dz \right\} \quad (12) \end{aligned}$$

Estas cuatro integrales pueden resolverse exactamente o aplicando métodos aproximados.

APROXIMACIÓN DE LA CONSERVACIÓN DEL MOMENTO

Consiste en considerar en la dirección del eje Z, donde no existe homogeneidad del espacio, que el momento se conserva.

$$q_z = \pm \left(\frac{N'\pi}{d} \pm \frac{N\pi}{d} \right)$$

de aquí, que en la ecuación (12) las cuatro integrales puedan ser aproximadas como funciones deltas de Kronecker:

$$I(\pm q_z) = \frac{1}{2d} \left\{ \delta_{\pm q_z, \frac{\pi}{d}(N-N')} + \delta_{\pm q_z, -\frac{\pi}{d}(N-N')} - \delta_{\pm q_z, \frac{\pi}{d}(N+N')} - \delta_{\pm q_z, -\frac{\pi}{d}(N+N')} \right\} \quad (13)$$

Haciendo

$$\begin{aligned} \delta_1 &= \delta_{\pm q_z, \frac{\pi}{d}(N-N')} & \delta_2 &= \delta_{\pm q_z, -\frac{\pi}{d}(N-N')} \\ \delta_3 &= \delta_{\pm q_z, \frac{\pi}{d}(N+N')} & \delta_4 &= \delta_{\pm q_z, -\frac{\pi}{d}(N+N')} \end{aligned}$$

Se obtiene que:

$$\begin{aligned} |I(\pm q_z)|^2 &= \frac{1}{4d^2} \left\{ \delta_1^2 + \delta_1 \delta_2 + \delta_2^2 + \delta_2 \delta_1 + \delta_3^2 + \delta_4^2 \right\} \\ &= \frac{1}{4d^2} \left\{ \delta_{\pm q_z, \frac{\pi}{d}(N-N')} + \delta_{\pm q_z, -\frac{\pi}{d}(N-N')} + \delta_{\pm q_z, \frac{\pi}{d}(N+N')} \right. \\ &\quad \left. + \delta_{\pm q_z, -\frac{\pi}{d}(N+N')} + 2\delta_{N,N'} \delta_{\pm q_z, 0} \right\} \quad (14) \end{aligned}$$

ya que $\delta_{N,N'}$ implica $\delta_{\pm q_z, 0}$ y viceversa. Luego los elementos matriciales de las ecuaciones (9) pueden ser escritos como:

$$\begin{aligned} \langle N', \vec{k}, N'_{\vec{q}} | e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \hat{b}_{\vec{q}} | N, \vec{k}, N_{\vec{q}} \rangle &= \sqrt{N} \delta_{N', N_{\vec{q}}-1} \delta_{\vec{k}', \vec{k}+\vec{q}_1} I(q_z) \\ \langle N', \vec{k}', N'_{\vec{q}} | e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} \hat{b}_{\vec{q}}^+ | N, \vec{k}, N_{\vec{q}} \rangle &= \sqrt{N+1} \delta_{N', N_{\vec{q}}+1} \delta_{\vec{k}', \vec{k}_1-\vec{q}_1} I(-q_z) \quad (15) \end{aligned}$$

Finalmente obtenemos el elemento matricial que caracteriza la interacción del electrón y el fonón.

$$\begin{aligned} \langle N', \vec{k}', N'_{\vec{q}} | \hat{\kappa}_{int} | N, \vec{k}, N_{\vec{q}} \rangle = C_{\vec{q}} \sqrt{N_{\vec{q}}} \delta_{N', N_{\vec{q}}-1} \delta_{\vec{k}, \vec{k}+\vec{q}_{\perp}} I(q_z) + \\ + C_{\vec{q}}^* \sqrt{N_{\vec{q}}+1} \delta_{N', N_{\vec{q}}+1} \delta_{\vec{k}', \vec{k}+\vec{q}_{\perp}} I(-q_z) \end{aligned} \quad (16)$$

El primer término en (16) corresponde a la absorción de un fonón, análogamente el segundo término corresponde a la emisión de un fonón. En ambos casos el fonón posee la energía $\hbar\omega_{\vec{q}}$.

Considerando el caso de temperatura $T=0K$, tenemos $N_{\vec{q}} = 0$. En este caso, el término de absorción se anula y obtenemos:

$$\langle N', \vec{k}', N'_{\vec{q}} | \hat{\kappa}_{int} | N, \vec{k}, N_{\vec{q}} \rangle = C_{\vec{q}}^* \delta_{\vec{k}', \vec{k}-\vec{q}_{\perp}} I(-q_z) \quad (17)$$

La autoenergía del polarón es dada por un segundo orden de la teoría de perturbaciones a través de:

$$E_{\vec{k}, N} - E_{\vec{k}, N}^{(0)} = \langle N', \vec{k}, 0 | \hat{\kappa}_{int} | N', \vec{k}, 0 \rangle + \sum_{N', \vec{k}, \vec{q}} \frac{|\langle N', \vec{k}', 1 | \hat{\kappa}_{int} | N, \vec{k}, 0 \rangle|^2}{E_{\vec{k}, N}^{(0)} - E_{\vec{k}', N'}^{(0)} - \hbar\omega_{\vec{q}}} \quad (18)$$

Es obvio que

$\langle N', \vec{k}, 0 | \hat{\kappa}_{int} | N', \vec{k}, 0 \rangle = 0$ y $E_{\vec{k}, N}^{(0)}$ es la energía del electrón en ausencia de perturbaciones fonónicas. Sustituyendo (17) en (18)

$$E_{\vec{k}, N} - E_{\vec{k}, N}^{(0)} = \sum_{N', \vec{q}} \frac{|C_{\vec{q}}^*|^2 |I(-q_z)|^2}{E_{\vec{k}, N}^{(0)} - E_{\vec{k}-\vec{q}_{\perp}, N'}^{(0)} - \hbar\omega_{\vec{q}}} \quad (19)$$

sustituyendo (3) en (19), haciendo;

$$\hbar\omega = - \left[\frac{\pi^2 \hbar^2}{2 m_e d^2} (N^2 - N'^2) - \hbar\omega_{10} \right] \text{ y considerando que:}$$

$|\vec{k} - \vec{q}_{\perp}|^2 = k^2 + q_{\perp}^2 - 2kq \cos \theta$, se obtiene:

$$E_{\vec{k}, N} - \frac{\hbar^2 k^2}{2 m_e^*} - \frac{\pi^2 \hbar^2}{2 m_e^* d^2} N^2 = \sum \frac{|C_{\vec{q}}^*|^2 |I(-q_z)|^2}{\frac{\hbar^2 k q_{\perp} \cos \theta}{m_e^*} - \frac{\hbar^2 q_{\perp}^2}{2 m_e^*} - \hbar\omega} \quad (20)$$

como

$$C_{\vec{q}}^* = ie \sqrt{\frac{2\pi\hbar W_{10}}{\epsilon^* V}} \frac{1}{q}$$

entonces

$$|C_{\vec{q}_z}^*|^2 = - \frac{2\pi e \hbar W_{10}}{\epsilon^* V} \frac{1}{q_1^2 + q_z^2} \quad y$$

$$\sum_{\vec{q}} \longrightarrow \frac{d}{2\pi} \sum_{q_z} \frac{2}{(2\pi)^2} \int q_1 dq_1 d\theta$$

Hallando la suma sobre q_z

$$\sum_{\vec{q}} |I(-q_z)|^2 \frac{1}{q_1^2 + q_z^2} = \frac{1}{2d^2} \left\{ \frac{1}{q_1^2 + (N-N')^2 \frac{\pi^2}{d^2}} + \frac{1}{q_1^2 + (N+N')^2 \frac{\pi^2}{d^2}} + \frac{\delta NN'}{q_1^2} \right\} \quad (21)$$

sustituyendo (21) en (20) se obtiene:

$$E_{\vec{k},N} - E_{\vec{k},N}^{(0)} = 0 - \frac{\hbar W_{10}}{\epsilon^* (2\pi)^2 2d^2} \sum_{N'} \left\{ \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \left[\frac{1}{q_1^2 + (N-N')^2 \frac{\pi^2}{d^2}} + \frac{1}{q_1^2 + (N+N')^2 \frac{\pi^2}{d^2}} + \frac{2\delta NN'}{q_1^2} \right] \frac{q_1 dq_1 d\theta}{\left[\frac{\hbar^2 k q_1 \cos \theta}{m_e^*} - \frac{\hbar^2 q_1^2}{2 m_e^*} - \hbar W \right]} \right\} \quad (22)$$

Despreciando las transiciones entre sub-bandas retenemos solamente el término $N' = N$ en (22), luego de integrar sobre el ángulo, se llega a:

$$E_{\vec{k},N} - E_{\vec{k},N}^{(0)} = - \frac{e \hbar W_{10} m}{2\epsilon^* \pi d^2 \hbar^2} \left\{ \int_0^\infty \frac{dq_1}{q_1 \sqrt{\left[q_1^2 + \frac{2mW_{10}}{\hbar} - 2kq_1 \right] \left[q_1^2 + \frac{2mW_{10}}{\hbar} - 2kq_1 \right]}} \right\} \quad (23)$$

MÉTODO EXACTO

La solución exacta de la ecuación (12) para el caso de emisión de fonones

$$I(-q_z) = \frac{1}{d} \frac{4 q_z k_z k'_z}{\left[q_z^2 - (k'_z - k_z)^2 \right] \left[(k_z + k'_z)^2 - q_z^2 \right]} \times \left[1 + (-i)^{N'+N+1} \cos q_z d - i \sin q_z d \right] \quad (24)$$

de aquí que:

$$|I(-q_z)|^2 = - \frac{32 q_z^z k_z^z k_z^z}{d^2 [q_z^2 - (k_z' - k_z)^2]^2 [(k_z + k_z')^2 - q_z^2]^2} \times$$

$$\times \left(1 + (-1)^{N'+N+1} \cos q_z d \right) \quad (25)$$

Sustituyendo (25) en la expresión (20) se obtiene finalmente para el cálculo exacto de la energía del polarón.

$$E_{\vec{k},N} - E_{\vec{k},N}^{(0)} = - \frac{8\pi^2 e \hbar \omega_{10}}{\epsilon^* d^6} \sum_{N'}^{\infty} \int_0^{\infty} \left[\frac{N'^2 N^2 q_z^2 [(-1)^{N'+N+2} \cos q_z d - 1]}{[q_z^2 - (N' - N)^2 \frac{\pi^2}{d^2}]^2 [(N+N')^2 \frac{\pi^2}{d^2} - q_z^2]^2} \times \right.$$

$$\times \left. \int_0^{\infty} \frac{q_{\perp}}{q_{\perp}^2 + q_z^2} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{\left[\frac{\hbar^2 k q_{\perp} \cos \theta}{m_e^*} - \frac{\hbar^2 q_{\perp}^2}{2 m_e^*} - \hbar \omega \right]} \right] dq_{\perp} dq_z \quad (26)$$

DISCUSIÓN DE LOS RESULTADOS Y CONCLUSIONES

En la expresión (22) la integral sobre el ángulo:

$$\int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{\frac{\hbar^2 k q_{\perp} \cos \theta}{m_e^*} - \frac{\hbar^2 q_{\perp}^2}{2 m_e^*} - \hbar \omega} =$$

$$= \frac{2\pi}{\frac{\hbar^2}{2 m_e^*} \sqrt{\left[q_{\perp}^2 + \frac{2 m_e^* \omega}{\hbar} - 2 k q_{\perp} \right] \left[q_{\perp}^2 + \frac{2 m_e^* \omega}{\hbar} + 2 k q_{\perp} \right]}}$$

sin embargo al realizarse la integración en q entre 0 y ∞ se obtiene que las expresiones (22), (23) y (26) son divergentes, cuestión que había sido predicha en [34]. Esto significa que la energía y la masa del polarón en una heteroestructura semiconductor del tipo pozo cuántico (QW) no puede ser calculada utilizando el Hamiltoniano de Fröhlich tridimensional (3D), donde el cristal se considera uniforme, continuo e infinito para electrones y fonones.

Otros autores (por ejemplo Rydley [3]) eliminan la divergencia considerando que la interacción es apantallada, lo que a su vez complica los cálculos y se suele recurrir a ciertas aproximaciones como la de la conservación del momento (MCA), en la cual se pueden cometer errores desde un 10 % hasta un 60 %, como se refleja en la comparación con el experimento [4-5].

En otros trabajos sobre super-redes y pozos cuánticos [6-7] se resuelve el problema de la divergencia considerando los fonones ópticos LO en una super-red como sistema estrictamente bidimensional (2D).

Mediante esta concepción en [2] se obtuvo que la energía del polarón para un sistema (2D) es:

$$E_{KN} = E_{KN}^{(0)} - \frac{\pi}{2} \alpha \left(\omega + \frac{k^2}{8m^*} \right)$$

donde α es la constante de Fröhlich es 3D y ω es la frecuencia del fonón, con esta expresión se demostró que el acoplamiento es $\frac{\pi}{2}$ veces más fuerte que en el 3D y la masa del polarón mejora según la expresión

$$m = m^* \left(1 + \frac{\pi\alpha}{8} \right), \text{ en relación con los sistemas 3D donde } m = m^* \left(1 + \frac{\alpha}{6} \right)$$

[8-9].

A pesar de que estos autores eliminan la divergencia en la energía del polarón y mejoran los cálculos teóricos todavía existen ciertas diferencias entre los resultados teóricos y experimentales, las cuales están dadas fundamentalmente en la utilización del Hamiltoniano tridimensional de Fröhlich que no considera el confinamiento de los fonones ópticos. Ello sugiere que debe utilizarse un Hamiltoniano de interacción que describa realmente las heteroestructuras semiconductoras de baja dimensionalidad, y considerando el acoplamiento del electrón con fonones LO confinados. Cálculos más realistas deberán incorporar además efectos de no parabolicidad, apantallamiento y temperaturas $T \neq 0K$.

BIBLIOGRAFÍA

1. Rydley, B.K. (1982)
J. Physc: Solid State Phys, 15, 5899-5917.
2. Sawaki, N. (1986)
Surface 170, 537-541.
3. Rydley, B.K. (1982)
J. Physc: Solid State Phys, 15, 5899-5917.
4. Mason, B.A. and S. Das Sarma (1982)
Phys. Rev 1331, 437.

5. Lassin, R. and S. Das Sarma (1985)
Phys. Rev. 1331, 5223.
6. Barker, S. Jr.; J.L. Merz and A.C. Gossard (1978)
Phys. Rev. 1317, 3181.
7. Sawaki, N. and I. Akasaki (1985)
Physica 13413, 494.
8. Kittel, C. (1963)
Quantum Theory of Solids (Wiley. New York).
9. Davidov, A.S. (1981)
Teoria del Sólido. (Mir. urrs).
10. Ando, T.; A. Fowler and F. Stern (1982)
Rev. Mod. Phys. 54, 437.
11. Arora, V. and A. Naeem (1985)
Phys. Rev. 1331, 3867.
12. Vojak, B.A.; W.D. Laidig; N. Holonyak, Jr. M.D. Camras; J.J. Coleman;
and P.O. Dapkus (1981)
J. Appl. Phys. 52, G21.
13. G. Bastard (1981)
Phys. Rev. B. 24, 4714.

Difracción del paquete de Bessel en un líquido giratorio compresible

José Marín Antuña

Departamento de Física Teórica, Universidad de La Habana

RESUMEN

En el presente artículo se expone de forma detallada el procedimiento de aplicación del método de Wiener-Hopf para obtener la solución teórica del problema de difracción de una onda no estacionaria tipo paquete de Bessel en una pared sumergida en un líquido giratorio y compresible. El método empleado puede ser utilizado para resolver problemas similares asociados a ecuaciones integrales de Fredholm de primera especie del tipo de Wiener-Hopf.

ABSTRACT

In this paper we expose in detail the procedure of application of Wiener-Hopf method to obtain the theoretical solution of diffraction problem of a Bessel's wave packet on a wall in a gyratory compressible liquid. This method can be used to solve similar problems associated with Fredholm's integral equations of first kind of the type of Wiener-Hopf equations.

INTRODUCCIÓN

La creación de modelos que permitan ganar claridad con respecto a los comportamientos generales de los fenómenos físicos en la dinámica de la

propagación y difracción de ondas no estacionarias en fluidos giratorios compresibles, viene ocupando parte de nuestra actividad en los últimos tiempos. Hemos constatado en ella la complejidad de los procedimientos matemáticos de solución de los problemas planteados; es por eso que puede resultar de interés metodológico para muchos investigadores teóricos la aplicación del método de Wiener-Hopf que aquí desarrollaremos.

En trabajos anteriores [1,2] fue demostrada la posibilidad de excitación y propagación en el interior de un líquido giratorio y compresible de una onda no estacionaria del tipo

$$u_0(x, t) = \theta(t - x_1) J_0 \left[\alpha \sqrt{t^2 - x_1^2} \right] \quad (1)$$

que denominamos paquete de Bessel. En el presente trabajo estudiaremos la difracción de dicha onda en el borde de una pared vertical semiinfinita sumergida en el líquido.

1. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA Y REDUCCIÓN A UNA ECUACIÓN DE WIENNER-HOPF

Sea un líquido ideal compresible que gira alrededor de un eje vertical con velocidad angular $\alpha/2$. Referiremos el estudio de las oscilaciones pequeñas en el líquido al sistema de coordenadas cartesianas (x_1, x_2, x_3) que gira con el líquido de forma tal que el eje Ox_3 coincida con el eje de rotación del líquido. Según ha sido demostrado [1,2] en este caso la presión dinámica y las componentes del vector de velocidades de las partículas del líquido $\vec{v} = \{v_1, v_2, v_3\}$ para el caso de movimientos bidimensionales (no dependientes de x_2) satisfacen la ecuación

$$L[u] = \frac{\partial^2}{\partial t^2} \left[\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \nabla^2 u + \alpha^2 u \right] - \frac{\partial^2 u}{\partial x_3^2} = 0 \quad (2)$$

con $\nabla^2 = \partial^2 / \partial x_1^2 + \partial^2 / \partial x_3^2$. Supongamos que la pared semi infinita

$\Gamma = \{(x_1, x_3) \in \mathbb{R}^2 \mid x_1 = 0, x_3 > 0\}$ se encuentra sumergida en líquido y que la onda (1) incide sobre la misma. Para investigar el proceso de difracción de esta onda en la pared Γ denotemos por

$$U(x, t) = u_0(x, t) + u(x, t) \quad (3)$$

donde $x = (x_1, x_3)$, al campo ondulatorio total, compuesto por la onda incidente (1) y el campo difractado $u(x, t)$. Por su significado físico estas funciones describen la componente v_1 del vector de velocidades de las partículas del líquido. Entonces, matemáticamente, para el campo difractado tendremos el siguiente problema:

$$\left\{ \begin{array}{l} L[u] = 0 \quad \forall x \in R^2 \setminus \Gamma, \quad t > 0 \\ \left. \frac{\partial^k u}{\partial t^k} \right|_{t=0} = 0, \quad k=0,1,2,3 \\ u|_{\Gamma} = -\theta(t) J_0(\alpha t) \end{array} \right. \quad (4)$$

Buscaremos la solución del problema (4) en la forma

$$\begin{aligned} u(x,t) = & -w_1(x,t) + \alpha \int_0^t J_1[\alpha(t-\tau)] w_1(x,\tau) d\tau + \\ & + 2 \int_0^t d\tau \int_0^\infty \mu(s,t-\tau) W(x-y(s),\tau) ds \end{aligned} \quad (5)$$

donde

$$w_1(x,t) = 2 \int_0^\infty W(x-y(s),t) ds$$

y

$$W(x,t) = \frac{1}{2\pi} \frac{\theta(t-|x|)}{\sqrt{t^2-|x|^2}} \cos \left[\alpha \frac{x_1}{|x|} \sqrt{t^2-|x|^2} \right]$$

es la solución singular generalizada de la ecuación (2). Aquí $y(s) = (0,s)$ y $|x|^2 = x_1^2 + x_3^2$. No es difícil comprobar que la función (5) satisface la ecuación y las condiciones iniciales para cualquier función $\mu(s,t)$ que debe ser determinada de la condición de frontera del problema (4). Con la ayuda de dicha condición, para $\mu(s,t)$ se obtiene la siguiente ecuación integral:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\pi} \int_0^t d\tau \int_0^\infty \mu(s,t-\tau) \frac{\theta(\tau-|x_3-s|)}{\sqrt{\tau^2-|x_3-s|^2}} ds = & -\theta(t) J_0(\alpha t) + \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \frac{\theta(t-|x_3-s|)}{\sqrt{t^2-|x_3-s|^2}} ds - \\ & - \frac{\alpha}{\pi} \int_0^t d\tau \int_0^\infty J_1(\alpha(t-\tau)) \frac{\theta(\tau-|x_3-s|)}{\sqrt{\tau^2-|x_3-s|^2}} ds, \quad x_3 \geq 0 \end{aligned} \quad (6)$$

Supondremos que la función incógnita $\mu(s,t)$ y su transformada de Laplace $M(s,p)$ satisfacen en el entorno del punto $s=0$ (borde de la pared Γ) las valoraciones siguientes:

$$|\mu(s,t)| \leq \frac{C(t)}{\sqrt{s}} \quad \forall t > 0, \quad |M(s,p)| \leq \frac{C(p)}{\sqrt{s}} \quad \forall \operatorname{Re} p > 0 \quad (7)$$

Para resolver la ecuación (6) apliquemos la transformada de Laplace respecto a la variable t . Obtenemos:

$$\frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} M(s, p) K_0(p|x_3-s|) ds = \frac{1}{\sqrt{p^2 + \alpha^2}} + \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} K_0(p|x_3-s|) ds -$$

$$- \frac{\alpha}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{p^2 + \alpha^2 - p}}{\alpha \sqrt{p^2 + \alpha^2}} K_0(p|x_3-s|) ds$$

ya que [3]

$$\frac{\theta(t-|x|)}{\sqrt{t^2 - |x|^2}} \cdot K_0(p|x|) \cdot J_n(\alpha t) \cdot \frac{(\sqrt{p^2 + \alpha^2} - p)^n}{\alpha^n \sqrt{p^2 + \alpha^2}}$$

De aquí se deduce la expresión

$$\frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \bar{M}(s, p) K_0(p|x_3-s|) ds = - \frac{1}{\sqrt{p^2 + \alpha^2}} \quad \forall x_3 \geq 0, \operatorname{Re} p > 0 \quad (8)$$

donde

$$\bar{M}(s, p) = M(s, p) - \frac{p}{\sqrt{p^2 + \alpha^2}} \quad (9)$$

La ecuación (8) para $\operatorname{Re} p > 0$ es una ecuación integral de Wiener-Hopf de primera especie en el semieje $x_3 \geq 0$.

2. SOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN DE WIENNER-HOPF

Pasemos a resolver la ecuación (8) con la ayuda de los métodos conocidos [4, 5, 6]. Con este fin consideremos la ecuación

$$\frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \bar{M}(s, p) K_0(p|x_3-s|) ds = f_+(x_3) + f_-(x_3) \quad (10)$$

donde

$$f_+(x_3) = \begin{cases} e^{-\epsilon x_3} & \forall x_3 > 0 \\ 0 & \forall x_3 < 0 \end{cases}, \quad f_-(x_3) = \begin{cases} 0 & \forall x_3 > 0 \\ e_-(x_3) & \forall x_3 < 0 \end{cases}$$

y $e_-(x_3)$ es cierta función acotada: $|e_-(x_3)| < B$. Apliquemos a la ecuación (10) la transformada de Fourier. Como resultado obtenemos:

$$\frac{\sqrt{2\pi}}{\pi} \bar{M}_+^{(F)}(k, p) K_0^{(F)}(k) = F_+(k) + E_-(k) \quad (11)$$

donde $\bar{M}_+^{(F)}(k, p)$ es la transformada unilateral de Fourier de $\bar{M}(s, p)$ y $E_-(k)$ es la transformada unilateral de Fourier de $e_-(x_3)$. Además

$$F_+(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{\infty} e^{-\varepsilon x_3} e^{ikx_3} dx_3 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{k+i\varepsilon}$$

y

$$K_0^{(F)}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} K_0(p|x|) e^{ikx} dx = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{\sqrt{p^2+k^2}}$$

Por consiguiente, (11) queda en la forma

$$\frac{\bar{M}_+^{(F)}(k,p)}{\sqrt{k^2+p^2}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{k+i\varepsilon} + E_-(k) \quad (12)$$

Apliquemos el método de factorización. De (12) tenemos que

$$\frac{\bar{M}_+^{(F)}(k,p)}{\sqrt{k+i\varepsilon}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{\sqrt{k-ip}}{k+i\varepsilon} + \sqrt{k-ip} E_-(k) \quad (13)$$

o, en virtud de que

$$\frac{\sqrt{k-ip}}{k+i\varepsilon} = \frac{\sqrt{-i\varepsilon-ip}}{k+i\varepsilon} + \frac{\sqrt{k-ip} - \sqrt{-i\varepsilon-ip}}{k+i\varepsilon}$$

de (13) obtenemos

$$\begin{aligned} \frac{\bar{M}_+^{(F)}(k,p)}{\sqrt{k+i\varepsilon}} &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{\sqrt{-i\varepsilon-ip}}{k+i\varepsilon} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{\sqrt{k-ip} - \sqrt{-i\varepsilon-ip}}{k+i\varepsilon} + \sqrt{k-ip} E_-(k) \end{aligned} \quad (14)$$

Llamemos Π_+ al conjunto de funciones analíticas univaluadas en el semiplano $\text{Im } k > -\text{Re } p$ y Π_- al conjunto de funciones analíticas univaluadas en el semiplano $\text{Im } k < \text{Re } p$. Entonces se ve que la parte izquierda de la ecuación (14) pertenece a Π_+ ya que tiene un punto de ramificación en $k = (\text{Im } p, -\text{Re } p)$. La parte derecha de (14) pertenece a Π_- ya que tiene un punto de ramificación en $k = (-\text{Im } p, \text{Re } p)$ y en el punto $k = -i\varepsilon$ tiene una singularidad evitable. Además, ambas partes tienden a cero para $|k| \rightarrow \infty$ como $|k|^{-1}$ en virtud de (7) y de la acotación de la función $e_-(x_3)$. Por consiguiente, de acuerdo con el esquema general del método de Wiener-Hopf existe una función entera única $P(k)$ igual a ambas partes en la franja $-\text{Re } p < \text{Im } k < \text{Re } p$ y tal que

$$\frac{\bar{M}_+^{(F)}(k,p)}{\sqrt{k+i\varepsilon}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{\sqrt{-i\varepsilon-ip}}{k+i\varepsilon} = P(k) \equiv 0 \quad (15)$$

La igualdad de (15) se deduce de la tendencia a cero de la función para $|k| \rightarrow \infty$ y del teorema de Liouville. Por tanto:

$$\bar{M}_+(F)(k, p) = \frac{e^{\frac{i\pi}{4}}}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\varepsilon + p} \frac{\sqrt{k + ip}}{k + i\varepsilon} \quad (16)$$

De esta manera, la transformada inversa de Fourier dará:

$$\bar{M}(s, p) = \frac{e^{\frac{i\pi}{4}}}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\varepsilon + p} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sqrt{k + ip}}{k + i\varepsilon} e^{-iks} dk \quad (17)$$

Con ayuda de los métodos de las integrales de contorno en el plano complejo se obtiene

$$I \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sqrt{k + ip}}{k + i\varepsilon} e^{-iks} dk = -2\pi i \operatorname{Res} \left[\frac{\sqrt{k + ip}}{k + i\varepsilon} e^{-iks}, -i\varepsilon \right] -$$

$$- \left\{ \int_{L_1} \frac{\sqrt{k + ip}}{k + i\varepsilon} e^{-iks} dk + \int_{L_2} \frac{\sqrt{k + ip}}{k + i\varepsilon} e^{-iks} dk \right\},$$

donde los contornos L_1 y L_2 se toman por los bordes del corte hecho desde el punto $(\operatorname{Im} p, -\operatorname{Re} p)$ paralelamente al eje imaginario en el semiplano inferior hasta el infinito.

Además

$$\operatorname{Res} \left[\frac{\sqrt{k + ip}}{k + i\varepsilon} e^{-iks}, -i\varepsilon \right] = \sqrt{-i\varepsilon + ip} e^{-\varepsilon s} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} e^{\frac{i\pi}{4}} \sqrt{p}$$

Para la integral por L_1 , haciendo $w = k + ip$ y luego $w = re^{-\frac{i\pi}{2}}$, tenemos:

$$\int_{L_1} \frac{\sqrt{k + ip}}{k + i\varepsilon} e^{-iks} dk = e^{-ps} \int_{-i\infty}^0 \frac{\sqrt{w} e^{-iws}}{w - ip + i\varepsilon} dw =$$

$$= e^{-\frac{i\pi}{4}} e^{-ps} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{r} e^{-rs} dr}{r + p - \varepsilon} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} -e^{-\frac{i\pi}{4}} e^{-ps} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{r} e^{-rs} dr}{r + p}.$$

De forma similar para la integral por L_2 , se obtiene

$$\int_{L_2} \frac{\sqrt{k + ip}}{k + i\varepsilon} e^{-iks} dk \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} e^{\frac{i\pi}{4}} e^{-ps} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{r} e^{-rs} dr}{r + p}.$$

Así pues de (17) para $\varepsilon \rightarrow 0$ obtenemos:

$$\bar{M}(s, p) = p + \frac{\sqrt{p}}{\pi} e^{-ps} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{r} e^{-rs} dr}{r + p} \quad (18)$$

La integral en (18) puede calcularse haciendo $r=x^2$. Entonces

$$I_1 = \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{r} e^{-rs}}{r+p} dr = 2 \int_0^{\infty} \frac{x^2}{x^2+p} e^{-x^2 s} dx = \sqrt{\frac{\pi}{2}} - 2pI_2$$

donde

$$I_2 = \int_0^{\infty} \frac{e^{-x^2 s}}{x^2+p} dx = e^{ps} \int_0^{\infty} \frac{e^{-s(x^2+p)}}{x^2+p} dx = e^{ps} I_3$$

Calculemos I_3 . De la relación

$$\frac{dI_3}{ds} = - \int_0^{\infty} e^{-s(x^2+p)} dx = - \frac{e^{-ps}}{2} \sqrt{\frac{\pi}{s}}$$

se deduce fácilmente que

$$I_3 = \frac{\pi}{2\sqrt{p}} \operatorname{Erfc} \left(\sqrt{ps} \right)$$

donde

$$\operatorname{Erfc}(z) = 1 - \Phi(z) = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-\xi^2} d\xi$$

es la función de error complementaria. Como resultado de (18) obtenemos:

$$\bar{M}(s,p) = p \left[\frac{e^{-ps}}{\sqrt{\pi ps}} + \Phi \left(\sqrt{ps} \right) \right] \quad (19)$$

La expresión (19) es la solución de la ecuación de Wiener-Hopf (10) para $\varepsilon \rightarrow 0$, es decir, de la ecuación (8) cuando la parte derecha es la unidad. Por lo tanto, multiplicando por $-1/\sqrt{p^2+\alpha^2}$, obtenemos la solución de la ecuación (8) en la forma

$$\bar{M}(s,p) = \frac{p}{\sqrt{p^2+\alpha^2}} \left[\frac{e^{-ps}}{\sqrt{\pi ps}} + \Phi \left(\sqrt{ps} \right) \right] \quad (20)$$

con lo que concluye la solución de la ecuación de Wiener-Hopf.

3. SOLUCIÓN DEL PROBLEMA Y SU INVESTIGACIÓN

De acuerdo con la fórmula (9), la transformada de Laplace $M(s,p)$ de la función buscada $\mu(s,t)$ tiene la forma

$$M(s,p) = - \frac{p}{\sqrt{p^2+\alpha^2}} \left[\frac{e^{-ps}}{\sqrt{\pi ps}} - \operatorname{Erfc} \left(\sqrt{ps} \right) \right] \quad (21)$$

Teniendo en cuenta [3] las conocidas transformadas de Laplace:

$$\frac{P}{\sqrt{p^2 + \alpha^2}} \equiv 1 - \alpha \frac{\sqrt{p^2 + \alpha^2} - p}{\alpha \sqrt{p^2 + \alpha^2}} = 1 - \alpha \mathcal{L}\{J_1(\alpha t)\}; \quad \mathcal{L}\{J_1(\alpha t)\} = \frac{J_1(\alpha t)}{p},$$

$$\frac{e^{-ps}}{\sqrt{\pi ps}} = \frac{1}{\pi} \frac{\theta(t-s)}{\sqrt{s} \sqrt{t-s}}, \quad \text{Erfc}(\sqrt{ps}) = \frac{1}{\pi} \frac{\sqrt{s}}{t} \frac{\theta(t-s)}{\sqrt{t-s}},$$

tenemos, finalmente:

$$\mu(s, t) = \eta(s, t) - \alpha J_1(\alpha t) * \eta(s, t) \quad (22)$$

donde

$$\eta(s, t) = \frac{1}{\pi} \frac{\theta(t-s)}{t\sqrt{s}} \sqrt{t-s} \quad (23)$$

y * representa la convolución en el tiempo de las funciones. Colocando (22) en (5) se obtiene la solución analítica del problema (4). El campo ondulatorio completo tendrá la forma (3), donde u_0 viene dada por (1).

Valoremos el resultado obtenido. No es difícil ver que la función $w_1(x, t) = 0$ para $|x_1| > t$. Además, ella también es igual a cero para $|x_1| < t$ si $x_3 < 0$ y $x_1^2 + x_3^2 > t^2$. Por otra parte, la integral que contiene a $\mu(s, t)$ en la fórmula (5) es distinta de cero sólo dentro del círculo $x_1^2 + x_3^2 < t^2$. Esta integral da el aporte fundamental al campo difractado concentrado en dicho círculo, como resultado de la difracción de la onda en el borde de la pared Γ . Por último, no es difícil comprobar que para $0 < x_1 < t$ y $x_3 > 0$ se cumple que

$$w_1(x, t) = \alpha \int_0^t J_1(\alpha(t-\tau)) w_1(x, \tau) d\tau = \theta(t-x_1) J_0\left(\alpha \sqrt{t^2 - x_1^2}\right)$$

y para $-t < x_1 < 0$ y $x_3 > 0$

$$w_1(x, t) = \alpha \int_0^t J_1(\alpha(t-\tau)) w_1(x, \tau) d\tau = \theta(t+x_1) J_0\left(\alpha \sqrt{t^2 - x_1^2}\right)$$

Lo dicho nos permite afirmar que el cuadro de difracción del paquete de Bessel es el siguiente. Toda la región de análisis $R^2 \setminus \Gamma$ puede ser dividida en el instante $t > 0$ en las regiones que a continuación se describen:

REGIÓN I: Para $x_3 > 0$: $\{x_1 < -t\}$; para $x_3 < 0$: $\{x_1 < t\} \cap \{x_1^2 + x_3^2 > t^2\}$.

En esta región sólo está presente la onda incidente $u_0(x, t)$.

REGIÓN II: $\{x_3 > 0\} \cap \{-t < x_1 < 0\} \cap \{x_1^2 + x_3^2 > t^2\}$

Aquí el campo total tiene la forma de la superposición de la onda incidente y la reflejada en la pared Γ .

REGIÓN III: $x_1^2 + x_3^2 < t^2$

En el interior de este círculo tiene lugar el proceso de difracción de la onda incidente en el borde de la pared Γ .

REGIÓN IV: El resto de R^2 . Aquí el campo total es cero. La parte correspondiente a $x_3 > 0$ constituye la "sombra" provocada por la pared Γ al incidir sobre ella el paquete de Bessel y para $x_3 < 0$ tenemos el frente de dicho paquete, dado por la ecuación $x_1 = t$.

Como puede apreciarse, el cuadro ondulatorio así descrito y que surge como resultado de la difracción es cualitativamente el mismo que aparece, por ejemplo, en la difracción de ondas acústicas descritas por la ecuación clásica de onda.

En un trabajo futuro abordaremos una solución más detallada del fenómeno estudiado en el presente artículo.

BIBLIOGRAFÍA

1. Marín Antuña, J. (1985)
Sobre la excitación de ondas en un líquido giratorio y compresible. *Revista de Ciencias Matemáticas*, Vol. VI, No. 1, 105-114.
2. Gabov, S.A. y J. Marín Antuña (1985)
Ecuación de ondas bidimensionales en un líquido giratorio y compresible y problemas de difracción. *Zhurnal vychis. matem. y matem. fiziki*, tom 25, No. 6, 873-882.
3. Bateman, H. y A. Erdélyi (1969)
Tablas de transformadas integrales. Serie SMB, T-1, M; Nauka.
4. Wiener, N. y R. Peli (1964).
Transformada de Fourier en el campo complejo. Moscú, Nauka.
5. Gajov, F.D. y Yu.I. Cherskv (1978)
Ecuaciones tipo convolución. Moscú, Nauka.
6. Noble, V. (1962)
El método de Wiener-Hopf. Moscú, Inost. Literatura.

Recibido: 6 de febrero de 1989

Descripción de un criostato para las mediciones de los efectos cinéticos en aleaciones de $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$

J. Capó Sánchez, R. Mestre Hechavarría y R. Morasén Cuevas
I.S.P. Frank País García

RESUMEN

Se analiza la construcción y funcionamiento de un soporte-criostato para las mediciones de las características cinéticas en semiconductores. Además se ofrece una valoración de los errores cometidos en las mediciones.

ABSTRACT

This work analyzes the construction and functioning of a cryostat for measuring the kinetic effects in semiconductors and semimetals in vacuum and within a great interval of temperatures. Besides it offers a study of the errors committed when measuring.

INTRODUCCIÓN

Actualmente las técnicas de medición de los fenómenos cinéticos se han desarrollado notablemente en los laboratorios de investigación, relacionadas con la caracterización de las propiedades termoeléctricas, galvano y termomagnéticas de materiales semiconductores o semimetales en función de la temperatura y el vacío /1,2/.

Es conocido que para la determinación de todos los coeficientes cinéticos es suficiente medir experimentalmente seis efectos: efecto Hall R,

magnetorresistencia $\rho(H)$, termo-f.e.m. $\alpha(H)$, efecto Nernst-Ettingshausen transversal Q , termoconductividad en campo magnético $\sigma(H)$ y el efecto Ridgi-Leduc S . Por esto en dependencia de los efectos investigados y de las condiciones de trabajo existen variados diseños.

En el modelo presentado se pueden medir cinco de los efectos anteriormente citados (excepto la termoconductividad), así como estudiar otros bajo condiciones isotérmicas que surgen en presencia de gradiente de temperatura, campo eléctrico, campo magnético longitudinal o transversales.

DESCRIPCIÓN DEL SOPORTE

El esquema fundamental del soporte-criorstato para las mediciones de los efectos cinéticos bajo presiones del orden de 10^{-4} mm de Hg y en un intervalo de temperaturas de 77 a 300 K se muestra en la Figura 1.

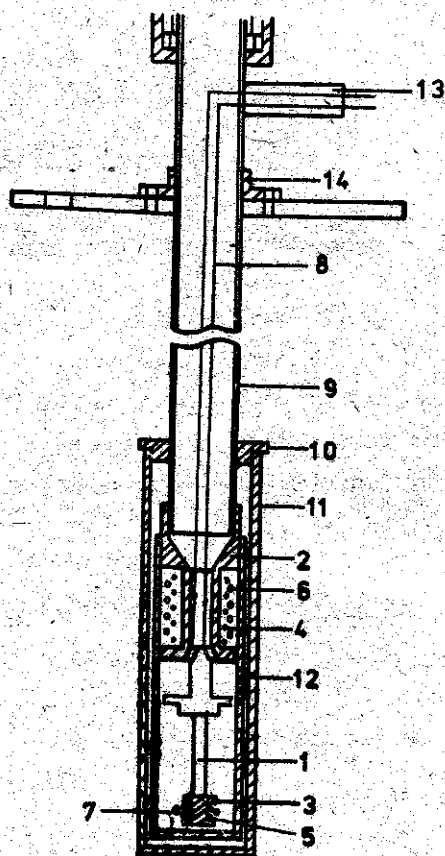


Figura 1. Esquema de las partes fundamentales del soporte-criorstato.

La muestra (1) por uno de sus extremos se suelda a la base del termostato (2) mediante un fundente de bajo punto de fusión (Bi-Sn) evitando que la misma se dañe. Por el otro extremo también se suelda una pequeña hornilla (3) que crea un gradiente de temperatura a lo largo de la muestra. El arrollamiento de las bobinas de fondo (6) y de gradiente se realizan en forma bifilar para compensar los efectos magnéticos de la corriente eléctrica. Además estas poseen las termorresistencias (4) y (5) de alambre de cobre cuyo diámetro es de 0.05 mm, y por encima de estas se arrolló un alambre de manganina para el calentamiento por efecto Joule producido en cada bobina (6) y (7).

La bobina de fondo se encuentra fijada en la base del termostato, la cual se cubre por medio de una pantalla aislante (12) para aumentar la estabilidad térmica del sistema. La base del termostato se fija al tubo portador (9) por medio de una soldadura, así como también la tapa (10) de la cápsula de hermeticidad (11). Tanto el tubo portador como la cápsula son de acero inoxidable.

A través de pequeños orificios que se encuentran en el interior del soporte están las sondas de medición (8) que conducen las señales registradas en la muestra hacia los equipos de medición, pasando a través de una cavidad tubular (3), sellada con piceno o resina epoxi para garantizar la hermeticidad del criostato.

Con ayuda de un casquillo (14) el tubo portador se fija a un círculo de plexiglas permitiendo sostener el criostato en la posición de medición, y a la vez, la conexión al sistema de vacío. Finalmente el soporte-criostato, se coloca en un vaso Dewar con nitrógeno líquido entre los polos del electroimán, para realizar las mediciones.

MEDICIÓN Y REGULACIÓN DE LA TEMPERATURA

La diferencia de temperatura a lo largo de la muestra se mide por medio de dos termopares de cobre-constantán de diámetro igual a 0.1 mm, situados convenientemente en la misma.

La alimentación de las bobinas de calentamiento y de gradiente se realizan a través de fuentes estabilizadas, y su regulación por el método de compensación.

El estado estacionario de la muestra se logra cuando se igualan las corrientes térmicas correspondientes al calor por efecto Joule desprendido por la bobina de fondo y el absorbido por el nitrógeno líquido contenido en un vaso Dewar.

La instalación permite obtener cualquier temperatura comprendida en el intervalo de 77-300 K, regulando la potencia del calentador de fondo a

través de un miliamperímetro y de acuerdo con la tabla de calibración de los termopares se establece la temperatura de trabajo.

ERRORES COMETIDOS

En la determinación del gradiente de temperatura se introduce un error menor al 1 % , resultando que la diferencia de temperatura entre los extremos de la muestra en condiciones estacionarias se mide con una exactitud del 2 % .

El error en la determinación de la longitud y la sección de la muestra es del 1 % , al igual que el error de las mediciones de las señales de voltaje en la misma.

En general el error en la determinación del efecto Hall es menor del 5 % , mientras que en la determinación de la termo-f.e.m. y de la resistencia específica de un 4 % .

Los límites de los errores están en concordancia con los resultados obtenidos /4/ en instalaciones similares.

CONCLUSIONES

Con este soporte-cristato se pueden medir clásicamente los efectos cinéticos más notables en condiciones isotérmicas, además puede utilizarse con fines docentes o de investigación de las propiedades eléctricas y magnéticas de materiales semiconductores o semimetales.

BIBLIOGRAFÍA

1. Heikers, R.R. y R.W. Ure (1961)
Thermoelectricity. New York.
2. Grabov, V.M. (1968)
Polumetalli. Leningrado.
3. Askerov, B.M. (1970)
Kineticheskie effectie b poluprovodnikov. Leningrado,
303 pág.
4. Damon, D.H. (1976)
Appl. Phys., 37, 3181.

Recibido: 12 de noviembre de 1988.

Obtención y caracterización de estructuras de AlGaAs/GaAs crecida por epitaxia desde fase líquida

E. Purón; L. Hernández y S. de Roux.
Instituto de Materiales y Reactivos para la Electrónica,
Universidad de La Habana

RESUMEN

En el presente trabajo se realiza un estudio de las propiedades estructurales y eléctricas del sistema $p\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{-}p\text{-GaAs-n GaAs}$ obtenido por el método de epitaxia desde fase líquida. Por topografía de rayos X se estudia la superficie de las muestras, y utilizando la técnica de doble cristal, se analiza el comportamiento del Aluminio en la capa-ventana de las estructuras crecidas.

ABSTRACT

A study of the structural and electric properties of $p\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{-}p\text{-GaAs-n GaAs}$ grown by liquid phase epitaxy are described. Topography and double crystal X-Ray techniques were employed in order to evaluate the Al composition in the window-epilayer.

INTRODUCCIÓN

Desde hace más de dos décadas la epitaxia desde fase líquida (LPE) ha demostrado ser la tecnología más eficiente para la fabricación masiva de dispositivos optoelectrónicos basados en los compuestos III-V y sus solu-

ciones [1], bien sean diodos electroluminiscentes, celdas solares o láser de inyección. También la técnica LPE se utiliza para fabricar dispositivos tales como osciladores GUNN, diodos IMPATT y transistores de efecto de campo (FET).

La técnica de crecimiento LPE se realiza a temperaturas inferiores al punto de fusión del sólido, resolviendo así problemas que surgen en el crecimiento desde fundidos a altas temperaturas. La composición del solvente y soluto incorporados a la capa crecida está determinado por el diagrama de fase del sistema, quien también delimita el rango de temperatura en el que pueda ocurrir el crecimiento.

De los materiales III-V, el más utilizado es el GaAs y sus soluciones sólidas AlGaAs. En el presente trabajo se realiza un estudio de las cualidades estructurales y eléctricas del sistema $p\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/p\text{-GaAs}/n\text{-GaAs}$ obtenido mediante la técnica LPE. Estas estructuras pueden ser utilizadas en celdas solares [2,3] fundamentalmente y en diodos electroluminiscentes infrarrojos de estructura simple [4].

PROCESO DE OBTENCIÓN

La estructura se obtiene en un equipo convencional de LPE con un bote de pistón [5] que permite el crecimiento de capas epitaxiales a partir de cuatro sustratos a la vez. Sobre un sustrato de GaAs dopado con Sn con concentración $n \sim 1,0 - 1,8 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ se deposita una capa epitaxial de GaAs, también con concentración de Sn, $n \sim 1,5 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, conocida como capa buffer. En esta capa se difunde posteriormente la llamada zona activa del dispositivo o zona de recombinación, por lo cual requiere una alta perfección cristalina. El espesor de la misma es de $15 - 20 \mu\text{m}$.

Con la misma tecnología, en proceso independiente a 870°C se comienza la deposición de la capa de (AlGa)As tipo p, y conjuntamente la creación de la juntura p-n en la capa buffer de GaAs. Esta se forma a partir de un fundido saturado, previamente calculado, compuesto de Al, Ga, As y Zn. En la medida que crece la capa (AlGa)As, la cual tiene función de ventana óptica en la celda solar, se va difundiendo el Zn en el sustrato de GaAs. Todo este proceso se lleva a cabo en atmósfera de hidrógeno. La temperatura final del crecimiento es 700°C . La estructura así obtenida se muestra en la Figura 1.

Los espesores obtenidos de la capa p-GaAs varían entre $1 - 2 \mu\text{m}$, con una frontera regular bien definida, mientras los espesores de la capa $p\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ varían en torno a $25 \mu\text{m}$. El fundido saturado fue calculado para obtener una estructura con el valor alrededor de $x = 0,0$ que de acuerdo con la literatura [6] es la composición en torno a la cual la variación del contenido de Al es muy pequeña en la medida que el espesor

de la capa epitaxial (AlGa)As se incrementa. Sobre la superficie de las estructuras obtenidas se deposita una capa de óxido nativo por método electrolítico con voltaje máximo de 60V, con el fin de proteger el AlGaAs de la acción del medio y crear una capa antirreflectante en la superficie libre del dispositivo.

CARACTERIZACIÓN DE LAS ESTRUCTURAS $p\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/p\text{-GaAs}/n\text{-GaAs}$

DISCUSIÓN

Para caracterizar eléctricamente las junturas se evaporaron contactos de Au-Zn sobre la capa p-AlGaAs y Au-Ge sobre la capa n-GaAs, siendo posteriormente tratadas térmicamente a 450 °C. En la Figura 2 se muestra una característica I-V en oscuridad, evidenciando un alto voltaje de ruptura y una magnífica calidad de la juntura. Esto evita las corrientes de fuga y produce altos voltajes de circuito abierto en las células solares. De estos resultados se infiere la conveniencia de crecer la capa buffer para construir en ella la juntura.

También se realizaron mediciones de DLTS para determinar la concentración de niveles profundos en la banda prohibida del GaAs originados por el crecimiento. En todas las muestras no se encontraron niveles con concentraciones mayores al límite de sensibilidad mínima del instrumento, a saber, 10^{12} cm^{-3} , coincidente con los mejores resultados obtenidos por las técnicas de LPE.

Para analizar las características morfológicas de las muestras se realizaron mediciones de topografía de rayos X, que permiten detectar imperfecciones o defectos mayores de $2 \mu\text{m}$. En la Figura 3 se reportan las fotos con aumento 120X de las superficies de dos muestras del mismo crecimiento. Una de ellas, la Figura 3a, muestra una superficie casi perfecta, en tanto la otra, la superficie está llena de defectos. Esto es consecuencia de las características propias del bote de pistón que permite el crecimiento a partir de cuatro sustratos a la vez. El primer sustrato en contacto con la solución debe ayudar a equilibrar ésta, pues siempre hay diferencia entre la temperatura del sustrato y del fundido. Por otra parte, sobre el último sustrato cae el fundido final con la mayor cantidad de impurezas y residuos siendo éste uno de los defectos principales del bote de pistón con muchas obleas donde todas no se mojan a la vez. En cambio los sustratos intermedios se encuentran en el centro del bote y el proceso de crecimiento en ellos se realiza más cerca de las condiciones ideales. Estas consideraciones son corroboradas por los resultados obtenidos: las Figuras 3a y 3b que corresponden a la muestra crecida sobre un sustrato intermedio y sobre el sustrato final respectivamente. La topografía fue realizada con la capa de óxido depositada sobre la superficie, evidenciando que los defectos estructurales repiten dicha capa de óxido.

El crecer capas ventanas gruesas de AlGaAs tiene la ventaja de disminuir la resistencia en serie de las celdas solares que deben trabajar bajo alta concentración [2]. Sin embargo, es importante que la composición de Al no disminuya mucho con el espesor. De ahí la importancia de mantener esta composición con poca variación cuando aumenta el espesor de esta capa ventana. El comportamiento típico del Al con el espesor se muestra en [7]. Mientras menor es el valor de x , el umbral de absorción se desplaza hacia mayores longitudes de onda del espectro solar y como consecuencia disminuye la eficiencia de la celda solar.

A través de mediciones de rayos X con la técnica del doble cristal se determinó la composición de Al y su variación con el espesor. El monocromador utilizado fue el típico para el GaAs, es decir, $\text{Cu } \langle \alpha_1 \rangle$ (36 KV, 25 mA.) Las reflexiones fueron observadas en la dirección $\langle 400 \rangle$ teniendo el sustrato de GaAs la dirección $\langle 100 \rangle$. El haz de rayos X siempre incidió sobre la misma región de la muestra.

La Figura 5 muestra un conjunto de cuatro espectros que asocian a los espesores diversos de la capa epitaxial de AlGaAs. Para la Figura 4a el espectro fue hecho después de eliminada la capa de óxido superficial mediante un ataque instantáneo de $\text{H}_2\text{SO}_4:\text{H}_2\text{O}_2:\text{H}_2\text{O}$ (5:1:1) reduciendo su espesor en 6 μm (Figuras 4-6). Dos ataques ulteriores con $\text{NH}_4\text{OH}:\text{H}_2\text{O}$ (1:10) disminuyeron en aproximadamente 10 μm de espesor en cada oportunidad (Figuras 4c, 4d).

De los espectros de la Figura 5 se observa que la distancia angular entre los picos se mantiene constante, independiente de los ataques realizados. El valor de composición de aluminio calculado fue $x = 0,59$. El primer espectro obtenido después de eliminado el óxido, posee un ensanchamiento mayor del máximo asociado a la capa epitaxial (47"). En el resto de los casos el ensanchamiento se mantiene constante e igual a 39". Estos valores son cinco veces mayores que los reportados teóricamente (8"), siendo la causa fundamental de ensanchamiento un pequeño gradiente de composición de Al, que por demás no es crítico ya que las variaciones significativas en la x producen pequeñas variaciones del parámetro reticular en el $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, muy cercano a su vez al valor del GaAs. En los primeros estratos de la capa epitaxial, en los más alejados de la juntura, el gradiente de composición es mayor como era de esperar.

CONCLUSIONES

Las estructuras obtenidas $\text{p-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As/p-GaAs/n-GaAs}$ por la técnica de LPE muestran una alta perfección en sus características eléctricas y estructurales. La formación de la juntura p-n en la capa buffer es casi perfecta evitando las fugas de corriente y proporcionando un valor alto en voltaje en circuito abierto. Durante el proceso de crecimiento no se crean niveles profundos en la banda prohibida del GaAs en concentraciones mayores

de 10^{12} cm^{-3} , evidenciado por las mediciones de DITS, en concordancia con los mejores resultados obtenidos por LPE.

La topografía de rayos X muestra que la superficie de las muestras obtenidas, a partir de los sustratos que se encuentran en posiciones intermedias del bote de pistón, son excelentes. Sin embargo, las muestras crecidas en las posiciones exteriores presentan una deficiente calidad morfológica de las superficies.

A través de mediciones de rayos X, utilizando la técnica de doble cristal, se demostró que en las estructuras crecidas, la composición de Al a lo largo del espesor de la capa epitaxial de AlGaAs se mantiene constante, facilitando de este modo una mayor recolección de los fotoportadores en la juntura.

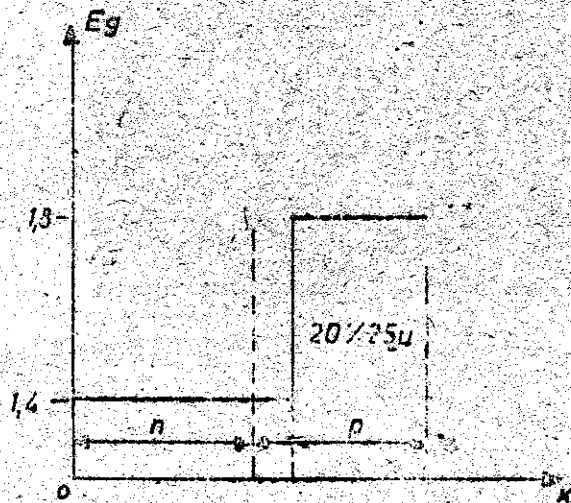
AGRADECIMIENTO

Este trabajo fue posible gracias a la colaboración del Instituto MASPEC de Italia, en especial del Dr. C. Bocchi y del Dr. P. Fransosi.

$p\text{-Al}_{0.7}\text{Ga}_{0.3}\text{As} : \text{Zn} (\sim 5 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3})$	$\sim 20 \times 25 \mu$
$p\text{-GaAs} : \text{Zn} (\sim 5 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3})$	$\sim 1-2 \mu$
$n\text{-GaAs} : \text{Sn} (\sim 3 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3})$	$> 15 \mu$

SUSTRATO

(a)

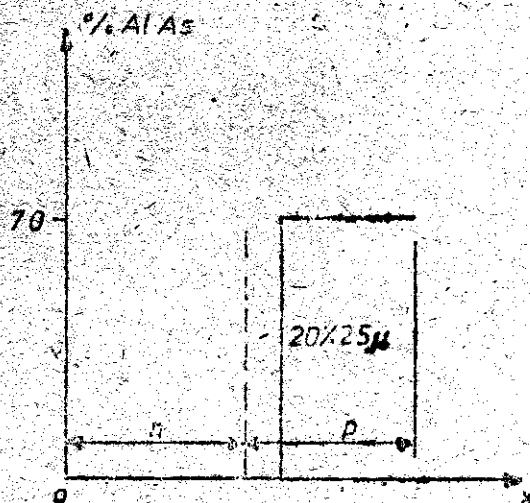


(a)

(a) Estructura obtenida.

(b) Variación de E_g con el espesor.

(c) Variación del % de AlAs con el espesor de la capa.



(c)

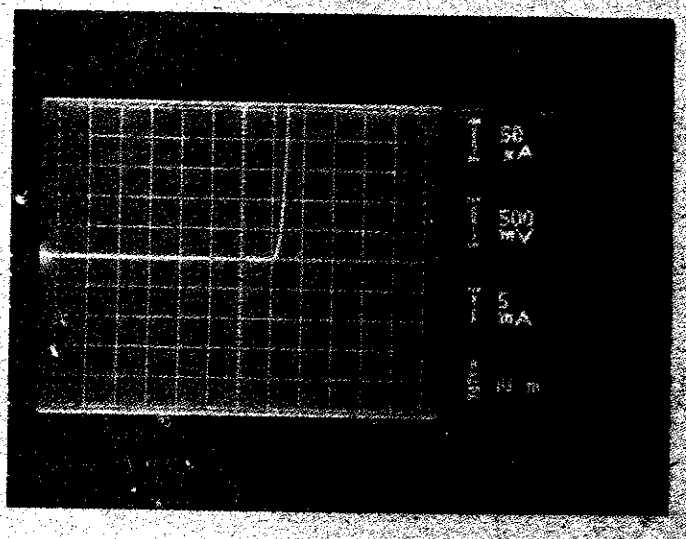


Figura 2. Característica IV en oscuridad
 diodo Au-Zn/p-Al_xGa_{1-x}As-pGaAs-n
 GaAs/au-Ge

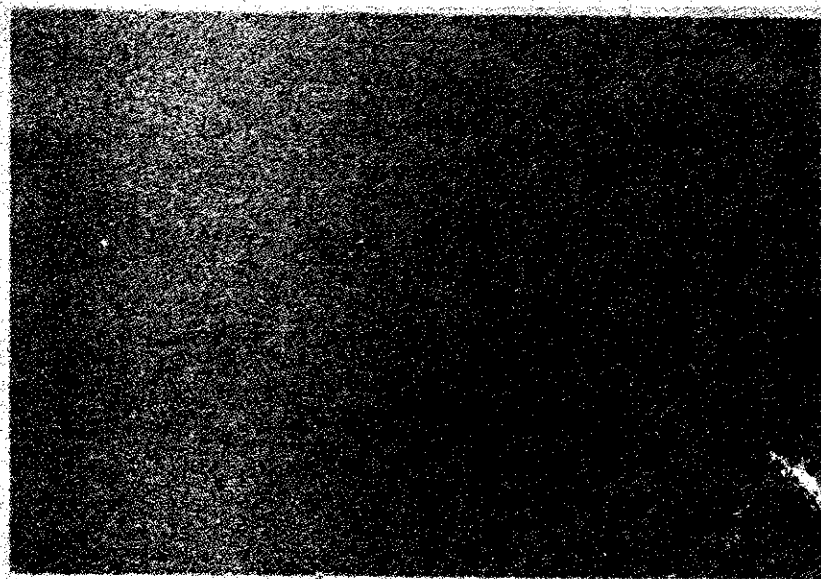


Figura 3.

a)



Figura 3. b)

Fotos de la superficie de dos muestras del mismo crecimiento obtenidas por Topografía de Rayos-X

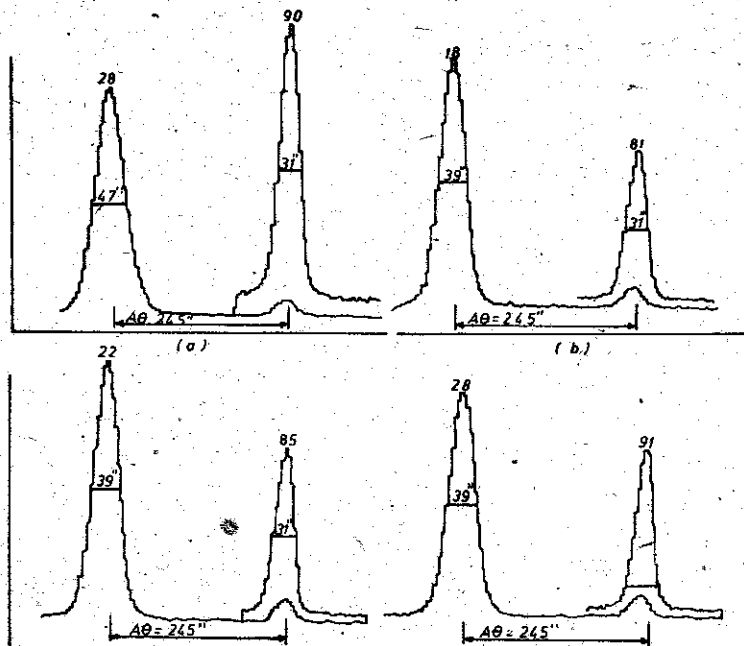


FIG. 4 ESPECTRO DE RAYOS X (Doble cristal) (d)
a) ELIMINADA LA CAPA DE ÓXIDO c) DESPUÉS DE $16\mu\text{m}$
b) DESPUÉS DE REDUCIR LA CAPA DE AlGaAs EN $6\mu\text{m}$ d) DESPUÉS DE $26\mu\text{m}$

BIBLIOGRAFÍA

- [1] Hsich, J.J. (1981)
Handbook on Semiconductors, Liquid Phase Epitaxy, Vol. 3, Cap. 6,
North Holland.
- [2] Díaz, P.; L. Hernández; J.A. Rodríguez y R. Romero (1982)
Crystal Res. & Technol., 17, 1025-1030, RDA.
- [3] Hernández, L.; T.A. Prutskij; E. Purón y R. Romero (1983)
Rev. Cubana de Física, 2.
- [4] Purón, E.; E. Vigil; J.A. Rodríguez; S. de Roux y B. González (1986)
Física y Tecnología de Semiconductores, Vol. 2, No. 3, México.
- [5] Alferov, Zh. I.; V.M. Andreev; S.G. Konnikov y V.R. Larionov (1976)
Krist und Technik, Vol. 8, 1013.
- [6] Prutskij, T.; E. Purón; J.A. Rodríguez; R. Romero y S. de Roux (1981)
Rev. Cubana de Física, 2.
- [7] Eliujin, V.A.; C.U. Karpov; E.L. Portnoi y D.N. Treatiakov (1978)
Pisma v Zh. T. F., Vol. 11, No. 4.

Recibido: 11 de julio de 1989

Ensayo de homogeneidad en patrones de acero mediante microanálisis espectral laser. Primera parte

Emilio Quevedo Ríos⁽¹⁾, Orestes Pino Martínez⁽¹⁾, Alejandro Doimeadios⁽²⁾,
Dania Cuenca Rodríguez⁽¹⁾

RESUMEN

Se investigó la homogeneidad química de un conjunto de patrones de aceros destinados al macroanálisis espectral de emisión con el objetivo de determinar si pueden ser utilizados en el microanálisis espectral con laser. En la interpretación de los resultados se comparó el procedimiento del Análisis de Varianza utilizado por los autores [1], [2] con el que sigue K. Danzer [3], llegando a la conclusión de la conveniencia de utilizar el primero.

ABSTRACT

The chemical homogeneity of several standard steels which are to be submitted to an emission spectral macroanalysis. Was investigated, in order to determine if they can be used in laser spectral microanalysis. In the final results there is a comparison between the procedure of variance analysis used by the authors [1], [2] and the latter K. Danzer arriving to the convenient to use the first procedure.

(1) ISTE "Oscar Lucero Moya"

(2) Fábrica "Héroes del 26 de Julio"

INTRODUCCIÓN

En la investigación de la distribución de los elementos químicos en muestras sólidas intervienen tres factores: la técnica instrumental, el método de muestreo y la interpretación de los resultados. El primero determina el error inherente a la técnica analítica y el volumen mínimo de la muestra que es posible analizar con esta técnica. El microanálisis espectral de emisión con fuente de excitación láser tiene de acuerdo con Moenke-Blankenburg [4] un error de 5 al 10 % y poder de resolución espacial de 10 a 300 μm horizontal y 1 a 300 μm vertical situándose entre el Análisis Espectral Clásico y el microanálisis con electrones.

El método de muestreo conduce, de acuerdo con K. Danzer [3], a dos formas de seleccionar los puntos para ser muestreados: la organización aleatoria y sistemática de los mismos. La primera la han utilizado los autores [1], [3], [5] para decidir si ciertos elementos químicos se distribuyen uniformemente sobre la superficie de la muestra. La organización sistemática del muestreo ha sido utilizada para investigar la forma en que se distribuyen los elementos químicos en la muestra, tales como gradientes de concentración en análisis lineales [6], [7]; perfiles de profundidad [8], [9] y homogeneidad de patrones de aceros [2].

El tratamiento y la interpretación de los resultados dependen de la organización de muestreo y se basan en diferentes modelos estadísticos. En el muestreo aleatorio es posible interpretar los resultados mediante el análisis de varianza [1], [2]. En el muestreo sistemático son posibles los modelos del análisis de varianza, el del análisis de regresión [10] y el del análisis armónico [11] (en la investigación de distribuciones periódicas).

En este trabajo nos ocupamos de los problemas relacionados con la interpretación de los resultados experimentales a partir del análisis de varianza (ANVA) ya que, aunque este modelo estadístico ha quedado bien fundamentado en la literatura [12], [13], cuando se aplica al estudio de la homogeneidad de los sólidos K. Danzer [3] por un lado y V.H. Hemschik [1] por el otro, preparan los test para las pruebas de hipótesis estadísticas de formas diferentes. Por esta razón consideramos necesario revisar las ideas y las suposiciones en que se fundamenta el análisis de varianza y las formas en que se aplican a los ensayos de homogeneidad de los sólidos.

Cualquiera que sea la forma de organizar el muestreo, siempre se seleccionan varios puntos $P_1, P_2, \dots, P_1, \dots, P_K$ sobre la superficie de la probeta para ser muestreado; el muestreo se repite n veces en cada uno de ellos, de modo que por cada punto seleccionado es posible estimar el valor medio $\bar{Y}_i$ de la magnitud que se mide ($Y = \log I_0/I_r$ o $\log C$) y la dispersión de

reproductibilidad S_i . Estos dos conjuntos de números se utilizan para preparar los test de verificación de hipótesis estadística y decidir si hay diferencias significativas entre los valores medios $\bar{Y}_i$ (muestra no homogénea) o por el contrario, las diferencias detectadas no son significativa (muestra homogénea).

Los test para la verificación de hipótesis estadísticas a partir del ANVA requieren del cumplimiento de las condiciones siguientes:

- 1) La magnitud medida en el muestreo debe tener distribución normal.
- 2) Cada acto de muestreo debe ser independiente de los anteriores.
- 3) Las dispersiones de reproductibilidad deben ser estadísticamente homogéneas.

En el muestreo con la técnica del microanálisis espectral laser la primera y la tercera de estas condiciones se cumplen según se deduce de los trabajos de Allemand C.D. [15], Dimitrov, G. [16] y Van Dedck [17] pero la segunda en general no se cumple. En particular Bieger [14] demostró que el muestreo laser repetido exactamente en el mismo punto produce la disminución de la señal (y) cuando aumenta al número de impactos. En el análisis espectral convencional tampoco se cumple esta condición, pero K. Danzer [3] discute una serie de procedimientos de muestreos que simulan el muestreo repetido en el mismo punto con las exigencias de esta condición. En particular el muestreo en puntos adyacentes ha sido utilizado por diferentes investigadores [2], [7], [9], [14] con el laser como fuente de evaporación, pero este procedimiento aumenta n veces el volumen mínimo que es posible analizar con esta técnica.

De cumplirse las tres condiciones anteriores la observación j -ésima en el punto i puede representarse por un modelo lineal:

$$Y_{ij} = Y + h_i + \epsilon_{ij} \quad (1)$$

donde: Y ; es el efecto medio verdadero.

h_i ; es el efecto medio verdadero debido a posibles cambios de concentración con respecto a Y en el punto i .

ϵ_{ij} ; incluye los efectos de todos los factores extraños (error) que influyen en el experimento, se supone que tiene distribución $N(0, \sigma)$, donde N representa la distribución normal.

El tratamiento de los h_i en los problemas de ensayos de homogeneidad se ha hecho de dos formas diferentes; K. Danzer [3] parte de que el método de muestreo garantiza que:

$$\sum_{i=1}^K h_i = 0 \quad (2)$$

V.H. Henschik [1] parte de las condiciones 1) y 2) supone además que h_1 está normalmente distribuida

$$N(0, \sigma I) \quad (3)$$

En la Estadística estas dos suposiciones tienen significados diferentes. Según B. Ostle [18] $\sum_{i=1}^K h_i = 0$ refleja la decisión del investigador de que únicamente está interesado con los K tratamientos (puntos) presentes en su experimento, mientras que la suposición de que los h_i tienen distribución $N(0, \sigma)$ refleja la decisión del investigador de que está interesado en una población de tratamientos (puntos) de los cuales únicamente una muestra de tamaño K tomada al azar está presente en su experimento. Estas dos elecciones conducen a lo que en estadística se conoce como Modelo I (efecto fijo) y Modelo II (efecto al azar), respectivamente.

Estos modelos se diferencian en la forma de tratar el error de segundo tipo β , (probabilidad de aceptar la hipótesis que se verifica cuando ésta es falsa) en las curvas OC (curvas operativas) para la optimización de n cuando hay más de una variable de clasificación, (como puede ocurrir en el muestreo sistemático) y en los tests de verificación de hipótesis estadística [18], [19]. En este trabajo partimos de las suposiciones del Modelo II del ANVA y se diseñaron los test y el tratamiento del error β de acuerdo con el mismo.

De la relación (1) se llega a:

$$T = E + I \quad (4)$$

donde:

$$t = \sum_{i=1}^K \sum_{j=1}^n (Y_{ij} - \bar{\bar{Y}})^2 \quad \text{Suma total de los cuadrados de las fluctuaciones,}$$

siendo $\bar{\bar{Y}} = \frac{1}{K} \sum_{i=1}^K \bar{Y}_i$

$$E = \sum_{i=1}^K \sum_{j=1}^n (Y_{ij} - \bar{Y}_i)^2 \quad \text{Suma de cuadrados de las fluctuaciones debido al error de procedimiento.}$$

$$I = \sum_{i=1}^K n(\bar{Y}_i - \bar{\bar{Y}})^2 \quad \text{Suma de cuadrados de las fluctuaciones debido a la inhomogeneidad del elemento químico.}$$

Von Helmut [1] demuestra que los cuadrados medios

$$S_E^2 = \frac{E}{k(n-1)} \quad \text{estima a } \sigma^2. \quad (5)$$

$$S_I^2 = \frac{I}{(k-1)} \quad \text{estima a } \sigma^2 + n\sigma_I^2 \quad (6)$$

$$S_t^2 = \frac{I}{kn-1} \quad \text{estima a } k(n-1) \sigma^2 + (k-1)(n\sigma_I^2 + \sigma^2) \quad (7)$$

De acuerdo con [18], [19], la hipótesis estadística a verificar en el Modelo II del ANVA es:

$H_0: \sigma_I^2 = 0$ muestra homogénea con la alternativa.

$H_1: \sigma_I^2 > 0$ muestra no homogénea.

H.G. Tucker [20] demuestra que el test para verificar esta hipótesis con nivel de significación α hay que prepararlo a partir del estadígrafo.

$$F = S_I^2 / S_E^2, \quad (8)$$

el cual se distribuye según la función de Snedecor-Fisher si es válida la hipótesis H_0 . Para llegar a esto el autor demuestra que S_I^2/σ^2 y S_E^2/σ^2 tienen distribuciones χ^2 y son independientes una de la otra.

De esta forma si:

$$F < F_{\alpha}(k-1, k(n-1)) \text{ Se aceptan } H_0. \quad (9)$$

$$F \geq F_{\alpha}(k-1, k(n-1)) \text{ Se rechaza } H_0. \quad (10)$$

El criterio (8) es el mismo para los modelos I y II del ANVA cuando se trata de una sola variable de clasificación como es el caso del muestreo aleatorio en los ensayos de homogeneidad.

K. Danzer [3] propone otro criterio para probar la hipótesis H_0 . Según este autor el test F debe formarse comparando S_t^2 y S_E^2 , o sea;

$$F = S_t^2 / S_E^2 \quad (11)$$

Así si:

$$F < F_{\alpha}(nk-1, k(n-1)) \text{ Se acepta } H_0.$$

$$F \geq F_{\alpha}(nk-1, k(n-1)) \text{ Se rechaza } H_0.$$

En este trabajo se comparan los tests (8) y (11) a partir de una data experimental extensa.

CONDICIONES EXPERIMENTALES

Se utilizó un espectógrafo modelo Q 24 en combinación con el microscopio laser LMA-10 ambos de la firma comercial (Ver Carl Zeiss Jena).

Mediante un proceso de optimización de la relación señal-ruido de los pares de líneas Cr II 267.7/ Fe II 268.48, Mn 257.610/ Fe II 257.793, Si I 288.1/ Fe I 288.4 se determinó que los parámetros de la instalación experimental adecuados para registrar las señales emitidas por estos elementos químicos son los siguientes:

A. Laser

- Tensión de la lámpara flash 995V.
- Cubeta "Q-switch" en el paso 2.
- Objetivo planocromático 16x/0.20

B. Chispa auxiliar:

- Tensión a electrodos 4.5 kV.
- Inductancia 500 μ H.
- Tiempo de retardo 250 μ s.
- Distancia entre electrodos 1 mm.

C. Espectógrafo:

- Rendija de entrada: 20 μ m de ancho y altura 1 mm.
- Sistema de enfoque de dos lentes.

Las radiaciones ópticas se registraron en placas espectrales del tipo WU 2 (ORWO).

Para la interpretación de los espectogramas se utilizó un microfotómetro MD-100. En cada raya espectral se fotometreó un área de 0.176 mm². La calibración de la emulsión fotográfica se realizó mediante la transformada P.

PLAN DEL EXPERIMENTO.

Los seis patrones que fueron analizados y cuyas nomenclaturas en la Tabla No. 1 son las del certificado del fabricante, se pulieron a espejos y se atacaron hasta observar sus estructuras metalográficas en una superficie de 3x1,5 cm² sobre la cual se muestrearon 9 puntos en cada uno de ellos.

El nivel de significación se fijó en 5 %. Para evaluar el error del tipo II se partió de la expresión propuesta por A. Bowker [19]:

$$\lambda^2 = F(\bar{v}_1, \bar{v}_2) F(v_2, v_1) \quad (11)$$

donde:

λ se determina en el Modelo II del ANVA según la fórmula:

$$\lambda = \sqrt{1+n (1+0.01P)^2} - 1 \quad (12)$$

Siendo P el por ciento máximo de variabilidad que se admite para los datos por encima del cual se desea rechazar la hipótesis H_0 .

P se determinó a partir de la tabla de clasificación de aceros [21], la cual, en el rango de concentración de los patrones (Si 0,180 a 0,710; Cr 0,353 a 1,87 y Mn 0,120 a 2,141), admite 12 % de variabilidad máxima en el Si. Para el Cr y el Mn el valor de P resultó superior, pero como se

trata de un registro simultáneo de estos elementos el valor de n lo fija en este caso el valor de P para el Si .

La función Snedecor-Fisher se representó mediante un polinomio de grado ocho en las variables α , v_1 y v_2 a partir de los datos de la tabla 22 utilizando un programa para microcomputadoras.

En el ANVA $v_1 = k-1$ y $v_2 = k(n-1)$, de modo que después de reorganizar los términos en (11) se resolvió la ecuación algebraica en n cuando se fijó el valor de β . Para $\beta = 43\%$ resultó $n=4$.

DISCUSIÓN DE LOS RESULTADOS

La Tabla No. 1 muestra los resultados de cada uno de los términos de la relación (11) para el cromo en los patrones analizados. Por $F_{exp} D$ se representan los resultados obtenidos mediante el test (9) que propone K. Danzer [3]; por F_{exp} se representan los resultados del test 8 del ANVA. Los valores teóricos de la distribución F para ambos criterios se dan en la parte inferior de la Tabla No. 1. Los símbolos NH y H colocados al lado de los tests significan no homogéneo y homogéneo respectivamente.

La Tabla No. 2 muestra los resultados de los tests F_{exp} y $F_{exp} D$ para Silicio y el Manganeseo.

De las Tablas 1 y 2 se observa que el criterio $F_{exp} D$ acepta como homogéneo un elemento cuando el criterio del ANVA puede rechazarlo, además si el test $F_{exp} D$ rechaza el test del ANVA rechaza también y por último si el test ANVA acepta la homogeneidad de algún elemento químico también lo acepta el criterio $F_{exp} D$.

La relación entre los dos criterios se obtiene sustituyendo (5), (6) y (7) en (4) obteniéndose:

$$(kn-1) S_t^2 = k(n-1) S_E^2 + (k-1) S_I^2 \quad (13)$$

La homogeneidad de un elemento químico se rechaza si

$$S_I^2/S_E^2 \geq F_{\alpha}(k-1, k(n-1)); \text{ tomando la igualdad}$$

$$F_D = A F + B \quad (14)$$

Siendo $A = (k-1)/(kn-1)$; $B = k(n-1)/(kn-1)$ y $F_0 = F(kn-1, k(n-1))$.

La relación lineal (14) se muestra en la gráfica No. 1.

De acuerdo con esta gráfica la zona de rechazo del ANVA a partir del valor crítico F se transforma en la zona de rechazo en el criterio F_0 en puntos situados sobre O por encima de la zona recta OM . Se puede demostrar que siempre se cumple $F_0 > F$, lo que justifica los resultados en las Tablas 1 y 2.

CONCLUSIONES

El empleo de estos patrones con fuente de excitación láser resultan limitados por la inhomogeneidad de silicio, cromo y manganeso en ellos. Estas conclusiones sacadas a partir del Modelo II del ANVA para una variable de clasificación resultan parciales ya que con un muestreo sistemático realizado a estos patrones demostró que las inhomogeneidades de estos elementos se localizan en direcciones perpendiculares a la longitud de los mismos. Estos resultados serán reportados en otro trabajo.

El criterio propuesto por K. Danzer [3] resulta menos exigente que el test del ANVA. Por otra parte el ANVA garantiza que S_E^2 y S_I^2 son estadígrafos con distribuciones de probabilidades independientes, condición que se exige para poder formar el test F. Sin embargo, la relación (13) muestra que S_t^2 no es independiente de S_E^2 . Por tal razón consideramos conveniente la utilización del test del ANVA para los ensayos de homogeneidad en sólidos.

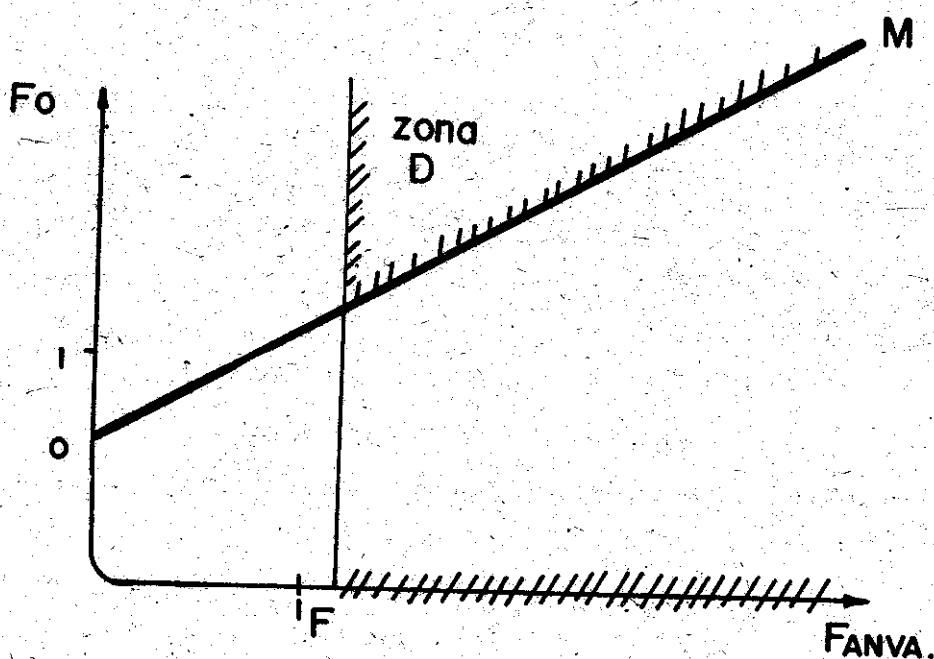


Figura 1

Tabla 1

Cr II 2677 / Fe II 2684					
Patron	T _{gl} (26)	E _{gl} (18)	I _{gl} (8)	F _{exp} D	F _{exp}
101b	.108	.019	.089	3.85 NH	10.293NH
102b	.118	.049	.061	1.532H	2.729NH
103b	.358	.219	.139	1.131H	1.429H
104b	.084	.043	.0415	1.35H	2.163H
213b	1.025	.496	.529	1.563H	3.317NH
214b	1.098	.359	.738	2.311NH	6.390NH

Tabla 2

Patron	Si I 288.1 / Fe I 288.4		Mn II 257.6 / Fe II 257.7	
	F _{exp} D	F _{exp}	F _{exp} D	F _{exp}
101b	H	NH	H	H
102b	NH	NH	H	NH
103b	H	NH	H	H
104b	H	H	H	H
213b	NH	NH	H	NH
214b	H	NH	H	H

BIBLIOGRAFÍA

- [1] Henschik, V.H. y W. Schuffenhaver (1963)
Experimentelle Technik der Physik. 11. 3, 214 p.
- [2] Maul, W. y W. Quillfed (1977)
Revista de Jena. No. 5, 234 p.
- [3] Danzer, K. (1984)
Spectrochimica. Acta Vol. 39 B, No. 8, 949 p.
- [4] Moenke-Blankenburg, L. (1984)
Advances in optical and electron Microscopy. Volume 9 (Ed. R. Baret).
Academic Press, London and New York.
- [5] Danzer, K. y otros (1979)
Anal. Chim. Acta 105, 1.
- [6] Krasnobaeva, N. y otros (1983)
Spectrochimica. Acta Vol. 38 B, No. 9, 829 p.
- [7] Rudnevskii, N.K. y otros (1979)
Zavod. Lab. 45 (9), 819.
- [8] Laqua, K. (1979)
Analytical Laser Spectroscopy. (Ed. N. Omeneto John Wiley and Sons): New York and London.
- [9] Oshemkov, A.A. (1984)
Metody Specktr. Anal. Miner. Ed. by Lontsikh S.V. Nauka.
- [10] Singer, R. y K. Danzer (1984)
Z. Chem. 24 (9), 339-41.
- [11] Inczedy, I. (1982)
Talanta. 29, 643.
- [12] Anderson, T.W. (1974)
An Introduction to Multivariate Statistical Analysis. Cap. 8,
pag. 178 (Ed. John Wiley and Sons). New York.
- [13] Wilks, S.S. (1962)
Mathematical Statistics. Cap. 10, 277 p. (Ed. John Wiley and Sons)
New York.
- [14] Bieber, B. (1974)
Revista de Jena. No. 4, 248.
- [15] Allemand, C.D. (1972)
Spectrochim. Acta Vol 27 B, 185 p.
- [16] Dimitrov, G. y T.Z. Zheleva (1984)
Spectrochim. Acta Vol 39 B, 1209 p.

[177] Van Dedok, W. y otros (1979)

Spectrochim. Acta Vol. 134 B, 359 p.

[188] Ostia, B. (1974)

Estadística Aplicada. Cap. 11, 315 p. Ed. Científico-técnica.

[191] Bowker, A.H. y G.J. Lieberman (1964)

Engineering Statistics. Cap. 10, 286 p., Ed. Revolucionaria.

[201] Tucker, H.G. (1973)

Introducción a la teoría matemática de las probabilidades y a la estadística. Cap. 12, 221 p. (Ed. Vicens-Vives) España.

[211] Gullaeu, A.P. (1978)

Metalografía. Tomo 2. Ed. Mir. Moscú.

[221] Eilen, S. (1969)

Industrial Engineering tables. Ed. Revolucionaria, Habana, Cuba.

Recibido: 3 de marzo de 1989

Tight-binding using the recursion method

Patricio Vargas, International Center for Theoretical Physics, Italy

ABSTRACT

The recursion method is reviewed and a new terminator for the continued fraction representation of the Green's function is presented.

Comparison with other known terminators is made by reconstructing known functions. Test calculations of the density of states in bcc-Fe is done using the first principles canonical tight-binding description of O.K. Andersen for the construction of the Hamiltonian in a cluster of 400 atoms. The calculation required a small amount of CPU-time and it was performed on a personal computer. Comparing with more exact k-space methods, the result reveals that the essential features of the DOS are very well reproduced even the saturation magnetization.

RESUMEN

Se revisa el método recursivo y se presenta un nuevo "terminador" para la representación de fracción continua de la función de Green. Se hace comparación con otros "terminadores" conocidos mediante reconstrucción de funciones conocidas, se realizan cálculos de prueba de la densidad de estados en Fe-bcc empleando la descripción de primeros principios para el caso fuertemente ligado de O.K. Andersen, a fin de construir el hamiltoniano en un "cluster" de 400 átomos. Los cálculos requieren poco tiempo

CPU y son realizados en una computadora personal. Comparando con métodos más exactos del espacio - k el resultado revela que las características esenciales de la DOS son reproducidas muy bien incluida la magnetización de saturación.

1. INTRODUCTION

Normally the calculation of the density of states (DOS) in disordered systems prevents the use of k -space techniques because of the lack of Bloch's theorem, and real space methods have to be used.

The use of supercell calculations, in which one recovers the periodicity of the systems by imposing periodic boundary conditions, is dangerous when certain "peaks" in the DOS appear due to the periodicity and in practice, various sizes of the supercell have to be calculated in order to discover which features in the DOS are caused by the boundary conditions. This is particularly difficult in systems having delocalized electrons.

The DOS, $D(E)$, is related to the number of states (NOS), $N(E)$, up to certain energy E ,

$$N(E) = \int_{-\infty}^E dx D(x) \quad (1)$$

Moreover, if we know the spectra of eigenvalues $\{E_l\}$, then

$$N(E) = \sum_{\text{levels}} g_l \theta(E - E_l) \quad (2)$$

where the factor g_l is the degeneracy of the level l , and $\theta(x)$ is the Heaviside step function (i.e. $\theta(x) = 1$ if $x \geq 0$ and $\theta(x) = 0$ if $x < 0$).

From Equations (1) and (2) we have

$$D(E) = \frac{dN(E)}{dE} \quad (3)$$

and

$$D(E) = \sum_{\text{levels}} g_l \delta(E - E_l) = \sum_{\text{states}} \delta(E - E_s) \quad (4)$$

In the last summation we suppress the factor g_l because we sum states. Normally we formulate the physical problem by modelling the Hamiltonian, $\hat{H}$ in some basis of functions reasonably complete and orthogonal.

The Eq. (4) can be written as:

$$D(E) = \text{Tr} \delta(E - \hat{H}) \quad (5)$$

This is of course a rather formal definition of $D(E)$ because the spectrum of $\hat{H}$ is unknown, and it is what we want to calculate.

However this definition is useful for the relation between the DOS and the Green's operator defined as:

$$\hat{G}(z) = (z - \hat{H})^{-1} \quad (6)$$

which can be calculated for each z by knowing the Hamiltonian in some representation.

The inverse of the operator $(z - \hat{H})^{-1}$ can be found by taking the trace of $\hat{G}$

$$\text{Tr}\hat{G}(z) = \sum_s \langle s | \hat{G} | s \rangle = \sum_s G_{ss}(z), \quad (7)$$

which is an invariant. In the representation in which $\hat{H}$ is diagonal we have:

$$\text{Tr}\hat{G}(z) = \sum_s \frac{1}{z - E_s}, \quad (8)$$

and, using Eq(4) this relation can be written as:

$$\text{Tr}\hat{G}(z) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{D(x)}{z - x} \quad (9)$$

The inversion of this relation for a given energy E is achieved by taking the imaginary part of $\hat{G}(z)$ in $z = E - i\zeta$:

$$\frac{1}{\pi} \text{ImTr}\hat{G}(E - i\zeta) = \frac{1}{\pi} \sum_s \frac{\zeta^2}{(E - E_s)^2 + \zeta^2}, \quad (10)$$

in the limit $\zeta \rightarrow 0^+$ the Lorentz curve of Eq. (10) becomes a Dirac delta function (in the sense of a distribution), so that we get finally the relation

$$\lim_{\zeta \rightarrow 0^+} \frac{1}{\pi} \text{ImTr}\hat{G}(E - i\zeta) = \sum_s \delta(E - E_s) = D(E) \quad (11)$$

If we want to calculate only the partial density of states associated with some "orbital" α of the basis functions, in which we have our Hamiltonian matrix we do not need to calculate the trace of $\hat{G}(z)$ but just the leading element $G_{\alpha\alpha}$ in the same representation as the Hamiltonian.

The local DOS associated with the orbital α , $D_{\alpha}(E)$ is given by:

$$D_{\alpha}(E) = \lim_{\zeta \rightarrow 0^+} \frac{1}{\pi} \text{Im}G_{\alpha\alpha}(E - i\zeta) \quad (12)$$

The Green's function is related with the moments of the partial DOS μ_n defined as:

$$\begin{aligned} \mu_n &= \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon D_{\alpha}(\varepsilon) \varepsilon^n = \langle \alpha | \hat{H}^n | \alpha \rangle \\ &= \sum_{\beta\gamma} \langle \alpha | \hat{H} | \beta \rangle \langle \beta | \hat{H} | \gamma \rangle \dots \langle \gamma | \hat{H} | \alpha \rangle, \end{aligned} \quad (13)$$

which is related with closed paths counting in a lattice defined by the set of orbitals $\{\alpha\}$, beginning from the α orbital hopping around its neighbouring orbitals and returning to α . Normally $\hat{H}$ is given in a tight binding representation so that the elements $\langle \alpha | \hat{H} | \beta \rangle$ in Eq. (13) only connect orbitals α, β if they are neighbours.

The local DOS can be reconstructed from its moments by using a continued fraction expansion of the integral giving the diagonal element of the Green's function¹:

$$G_{\alpha\alpha}(z) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{D_{\alpha}(x)}{z - x} \quad (14)$$

$$= \frac{\alpha_1}{z - \alpha_2 - \frac{\alpha_2 \alpha_3}{z - \alpha_3 - \alpha_4 - \frac{\alpha_4 \alpha_5}{z - \alpha_5 - \alpha_6 - \dots}}}$$

where the coefficients α_i are given by:

($n > 0$, $\mu_0 = 1 = \alpha_1$, i.e. the DOS is normalized)

$$\alpha_{2n+1} = \frac{\Delta_{n-2} \Delta'_{n-1}}{\Delta_{n-1} \Delta'_{n-2}} \quad (15)$$

$$\alpha_{2n+2} = \frac{\Delta_n \Delta'_{n-2}}{\Delta_{n-1} \Delta'_{n-1}}$$

where the Δ 's are the following determinants: ($\Delta_{-1} = \Delta'_{-1} = 1$):

$$\Delta_n = \det \begin{vmatrix} \mu_0 & & & \mu_n \\ & \ddots & & \\ & & \ddots & \\ \mu_n & & & \mu_{2n} \end{vmatrix} \quad (16)$$

$$\Delta'_n = \det \begin{vmatrix} \mu_1 & & & \mu_{n+1} \\ & \ddots & & \\ & & \ddots & \\ \mu_{n+1} & & & \mu_{2n+1} \end{vmatrix}$$

This method, is known² to be very unstable because the evaluation of the Δ determinants with increasing order moments is very difficult. An easy way to see this difficulty is to analyze a DOS which is normalized and non zero in the (0,1) interval (by rescaling the energy), then it is easy to see that

$$0 \leq \mu_n \leq M \frac{1}{n+1} \quad (17)$$

where M is the maximum of $D(E)$ in the $(0,1)$ interval and therefore $\mu_n \rightarrow 0$ as $n \rightarrow \infty$, hence Δ_n , and $\Delta'_n \rightarrow 0$ for large values of n .

Another way to obtain a continued fraction representation of the elements of the Green's function is given by the recursion method.

2. RECURSION METHOD

The origin of the Recursion method is due to Lanczos³ and essentially is a method for transforming a symmetric matrix into a tridiagonal form. The modern version of the recursion method connecting it with solid state physics problems was given by R. Haydock⁴. The recursion method is a real space method for the calculation of the Green's function elements and local DOS. In order to calculate the local DOS associated with some electron orbital α ,

$$D_\alpha(E) = \frac{1}{\pi} \text{Im} G_{\alpha\alpha}(E - i0^+), \quad (18)$$

we begin by 'placing' the electron in the orbital α , defining an initial state for the system (the initial vector for the tridiagonalization process) which is:

$$|1\rangle = (0, 0, \dots, \alpha, 0, 0, \dots)^T \quad (19)$$

By defining a recurrence relation we generate a new basis $\{|n\rangle\}$. In this new basis the original Hamiltonian $\hat{H}$ has a tridiagonal form.

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & & & \\ b_1 & a_2 & b_2 & & \\ & b_2 & a_3 & b_3 & \\ & & & \ddots & \ddots \\ & & & & a_n & b_n \\ & & & & b_n & a_{n+1} \end{pmatrix} \quad (20)$$

The recurrence relations which define the transformation to the tridiagonal form are ($n = 2, 3, \dots$)

$$b_1 |2\rangle = \hat{H} |1\rangle - a_1 |1\rangle, \quad (21)$$

$$b_n |n+1\rangle = \hat{H} |n\rangle - a_n |n\rangle - b_{n-1} |n-1\rangle$$

The a_n , b_{n-1} are the coefficients to orthogonalize $\hat{H} |n\rangle$ to the preceding vectors, $|n\rangle$ and $|n-1\rangle$, and b_n is the coefficient to normalize $|n+1\rangle$ to unity.

The coefficients $\{a_n, b_n\}$ are given by:

$$a_n = \langle n | \hat{H} | n \rangle \quad (22)$$

$$b_n = \langle n+1 | \hat{H} | n \rangle.$$

They describe, as we will see, higher order moments of the density of states and represent the influence of atoms increasingly remote from the chosen orbital α on the local DOS.

The new vectors generated by the Lanczos recursion method defined in Eq. (21) generate an orthonormal set in the Krylov subspace¹ $\{|1\rangle, \hat{H}|1\rangle, \hat{H}^2|1\rangle, \dots, \hat{H}^{n-1}|1\rangle\}$.

The basic Lanczos procedure can be viewed as a Gramm-Schmidt orthogonalization of the set of Krylov vectors $\{|1\rangle, \hat{H}|1\rangle, \hat{H}^2|1\rangle, \dots\}$.

The new basis is therefore generated by repeated operation with $\hat{H}$, each operation allowing the electron to hop further from the initial orbital α . This procedure is very easy to implement numerically, because we need to perform only matrix multiplications. However, round off errors due to finite precision computers, make possible that the new vectors generated after some iterations are not orthogonal to all the preceding ones.

In practice to improve the numerical stability of the recursion the formulae given in Eq. (22) are replaced by the following ones:

$$a_n = \langle n | (\hat{H} |n\rangle - b_n |n-1\rangle) \quad (23)$$

$$b_n = |\hat{H}|n\rangle - a_n |n\rangle - b_{n-1} |n-1\rangle$$

From Eq. (19) it is easy to calculate $G_{\alpha\alpha}(E) = \langle \alpha | (E - \hat{H})^{-1} | \alpha \rangle = \langle 1 | (E - \hat{H})^{-1} | 1 \rangle$, because $E - \hat{H}$ is:

$$E - \hat{H} = \begin{pmatrix} E-a_1 & -b_1 & 0 & 0 & \dots \\ -b_1 & E-a_2 & -b_2 & 0 & \dots \\ 0 & -b_2 & E-a_3 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (24)$$

and $\langle 1 | (E - \hat{H})^{-1} | 1 \rangle$ is the leading element of the inverse of this matrix, which is:

$$G_{\alpha\alpha} = \frac{\det D_1}{\det D_0} = \frac{1}{\det D_0 / \det D_1} \quad (25)$$

¹ Given a $n \times n$ H matrix and a starting vector $|v\rangle$, the family of Krylov subspace K^k , $k = 1, 2, \dots, n$ is defined as follows:
 $K^k = \text{space}\{|v\rangle, H|v\rangle, H^2|v\rangle, \dots, H^{k-1}|v\rangle\}$

Now, $\det D_0 = (E - a_1) \det D_1 - b_1^2 \det D_2$, hence

$$G_{\alpha\alpha} = \frac{1}{\left(E - a_1 - \frac{b_1^2}{\det D_1 / \det D_2} \right)} \quad (26)$$

Similarly:

$$\frac{\det D_1}{\det D_2} = E - a_2 - \frac{b_2^2}{\det D_2 / \det D_3} \quad (27)$$

etc. This yields the continued fraction representation of $G_{\alpha\alpha}$:

$$G_{\alpha\alpha}(E) = \frac{1}{E - a_1 - \frac{b_1^2}{E - a_2 - \frac{b_2^2}{E - a_3 - \frac{b_3^2}{\ddots}}}} \quad (28)$$

Comparison of this expression with Eq. (14) gives the explicit relation between the moments of the local DOS and the recursion coefficients.

Due to the finite size of the Hamiltonian matrix, which implies that we are studying a finite cluster, and due to computer time reasons, one is limited to calculate up to some level in the recursion coefficients. For electronic structure calculations of bulk properties in transition metals we usually stop after the 10-th level for the recursion coefficients of the s and p partial DOS, and after the 20-th level for the d-states.

The reason for this is that the electronic s- and p-states are of long range order compared with the d-states, so that going beyond the 10-th level in the calculation of the partial DOS for the most central atoms in clusters of around 1500 atoms introduces non negligible surface effects, which modifies the shape of the partial DOS.

However, for an accurate recovery of the singularities of the DOS, such as band edges and van Hove singularities within the bands, it would be necessary to consider too many recurrences. This is done in practice by truncating the continued fraction with a terminator $T(z)$ after some level n .

$$G_{\alpha\alpha}(z) = \frac{1}{a - a_1 - \frac{b_1^2}{z - a_2 - \frac{b_2^2}{\ddots z - a_n - b_n^2 T(z)}}} \quad (29)$$

Here $T(z)$ is a terminator applied at the n -th level. Its introduction does not alter the first $2n$ -moments of the partial DOS.

3. TERMINATOR

Normally one uses the 'square root terminator' after the last calculated level. This terminator assumes that after the n -th level the coefficients are taken as constants and equal to their asymptotic limits a_∞, b_∞ . These values are directly related to the band limits E_B, E_T (bottom and top of the band)²:

$$\begin{aligned} a_\infty &= \frac{1}{2} (E_T + E_B) \\ b_\infty &= \frac{1}{2} (E_T - E_B) \end{aligned} \quad (30)$$

However, the asymptotic limits are generally not known and the square root terminator gives often spurious oscillations in the DOS curve, specially when a gap is present, due to the abrupt matching between the known calculated coefficients and the asymptotic ones.

The most common implementation of this terminator which evaluates the asymptotic values a_∞ and b_∞ with the calculated coefficients is due to Beer and Pettifor⁵.

More sophisticated approaches for terminating the continued fraction have been given by C. Nex^{6,7}.

We now introduce a different type of terminator. To this effect we note that the recursion method, which transforms the Hamiltonian $\hat{H}$ to a tridiagonal form, is equivalent to transform the original problem into a semiinfinite linear chain and the asking for the Green's function matrix element on the surface atom:

$$H \Rightarrow \sum_{n=1}^{\infty} |n\rangle a_n \langle n| + \sum_{n=1}^{\infty} (|n\rangle b_n \langle n+1| + |n\rangle b_{n-1} \langle n-1|) \quad (31)$$

($b_0 = 0$)

$$\begin{array}{ccccccc} & b_1 & & b_2 & & b_3 & & b_4 \\ a_1 & \xrightarrow{\quad} & a_2 & \xrightarrow{\quad} & a_3 & \xrightarrow{\quad} & a_4 & \xrightarrow{\quad} & a_5 \\ 1 & - & 2 & - & 3 & - & 4 & - & 5 \dots \end{array}$$

The physical interpretation of a terminator T which is applied after the n -level of recursion is to introduce some effective medium around the atom in which we are interested. Then we expect this medium to be less important if the terminator is applied as far as possible from the surface atom, and with a smooth matching with the calculated coefficients.

The procedure we used for terminating the continued fraction given in Eq. (29) is based on the existence of band limits and asymptotic values for the recursion coefficients, which satisfy the relation of Eq. (30).

For the following analysis it is convenient to rewrite the continued fraction given in Eq. (29) by the following relation:

$$x_n = E - a_n - \frac{b_n^2}{x_{n+1}}, \quad (32)$$

$$n = 1, 2, \dots$$

The assumption of the asymptotic values implies that

$$x_\infty = E - a_\infty - \frac{b_\infty^2}{x_\infty}, \quad (33)$$

By solving this equation for x_∞ one finds⁸

$$x_\infty = b_\infty e^{i\phi}, \quad (34)$$

$$\text{where } \phi = \cos^{-1} \left(\frac{E - a_\infty}{2b_\infty} \right), \quad -\pi < \phi < \pi$$

We examine the expression for Eq. (32) in the asymptotic region by defining

$$x'_n = x_n - x_\infty, \quad (35)$$

$$a'_n = a_n - a_\infty,$$

$$b'_n = b_n - b_\infty.$$

Eq. (32) can now be written as follows:

$$x'_n + x_\infty = (E - a_\infty) - a'_n - \frac{(b_n'^2 + 2b'_n b_\infty + b_\infty^2)}{(x'_{n+1} + x_\infty)} \quad (36)$$

By keeping only linear terms in b'_n and using Eq. (34) we get the following recurrence relation for x'_n :

$$x'_n = a'_n - 2b'_n e^{-i\phi} + e^{-2i\phi} x'_{n+1} \quad (37)$$

Now, defining $-a'_n$ and $-2b'_n$ as the even and odd terms of a single sequence δ_n ,

$$\delta_{2n} = a'_n, \quad (38)$$

$$\delta_{2n+1} = -2b'_n,$$

we obtain

$$x'_n = \delta_{2n} + \delta_{2n+1} e^{-i\phi} + x'_{n+1} e^{-2i\phi}, \quad (39)$$

hence by iterating:

$$x'_n = \delta_{2n} + \delta_{2n+1} e^{-i\phi} + \delta_{2n+2} e^{-2i\phi} + \delta_{2n+3} e^{-3i\phi} + \dots$$

We know that in the limit $x_n^i \rightarrow 0$, so that x_n^i as a form of a Fourier series:

$$x_n^i = \sum_{k=0}^{\infty} \delta_{2n+k} e^{-ik\phi} \quad (40)$$

$$-\pi < \phi < \pi.$$

The coefficients are given by:

$$\delta_m = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\phi x_n^i(\phi) e^{i(m-2n)\phi} \quad (41)$$

From this expression we know the δ sequence up to a certain level from the calculated coefficients. The idea was to extrapolate the δ sequence by using all first known values of δ_n .

The fitting was done simply by a least square procedure. This is equivalent to assume that after some level M all terms of the sequence δ_k are a linear combination of all preceding ones:

$$\delta_k = \sum_{j=1}^M c_j \delta_{k-j} \quad k > M. \quad (42)$$

In terms of the new vectors which are generated by the recursion procedure the last relation indicates that for studying those states the first M vectors alone generate all the space. The relation given in Eq. (42) is equivalent to assuming that the δ sequence can be written as follows:

$$\delta_n = \sum_{i=1}^M d_i z_i^n, \quad (43)$$

where z_i are the roots of the following polynomial:

$$z^M = \sum_{j=1}^M c_j z^{M-j} = 0. \quad (44)$$

Eq. (43) is the same as the assumption made by Allan⁹ to find the best fit of the δ 's.

If one uses Eq. (42) separately for the a_n and b_n sequences the problem is then reduced to the one studied by Trias et al¹⁰.

4. TEST CALCULATIONS

In order to check the quality of the linear terminator we applied it to reconstruct known functions for which we can calculate the moments of the DOS. Using Eqs. (14)-(16) we find the coefficients $\{a_n, b_n\}$ appearing in Eq. (28).

$$a_n = \frac{1}{\Delta'_{n-2}} \left[\frac{\Delta_{n-2} \Delta'_{n-1}}{\Delta_{n-1}} + \frac{\Delta_{n-1} \Delta'_{n-3}}{\Delta_{n-2}} \right], \quad (45)$$

$$b_n^2 = \frac{\Delta_n \Delta_{n-2}}{\Delta_{n-1}^2}$$

The test functions we used (all normalized) are given by:

$$D(x) = \begin{cases} 1 & 0 < x < 1 \\ 0 & \text{elsewhere} \end{cases};$$

$$D(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}\sqrt{x} & 0 < x < 1 \\ 0 & \text{elsewhere} \end{cases}; \quad (46)$$

$$D(x) = \begin{cases} 1 - \cos(4\pi x) & 0 < x < 1 \\ 0 & \text{elsewhere} \end{cases};$$

$$D(x) = \begin{cases} 1 & 0 < x < \frac{1}{2} \\ 2 - \frac{3}{4} & \frac{1}{2} < x < 1 \\ 0 & \text{elsewhere} \end{cases}$$

The present calculations were done on a personal computer with single precision. For all the above functions we calculated the Δ determinants and through Eq. (45) the coefficients a_n , b_n up to $n = 7$. The results of applying the terminator $T(z)$ of the Cambridge Recursion Library of Nex⁷, the one of Beer and Pettifor⁵ and the linear terminator after the $n=7$ level in the continued fraction of Eq. (29) and the using Eq. (18) for recover the initial function $D(x)$ are shown in Figs. (1-4).

The linear terminator was used by extrapolating up to 500 pairs of coefficients and the using the asymptotic limits (i.e., a_{500} and b_{500}) for closing the continued fraction with the square root.

The main result obtained by using the linear terminator is the supression of spurious peaks in the DOS in all functions $D(x)$ which do not have a gap. In the $D(x)$ function which has a gap the linear method produces also spurious peaks which arise principally because the condition given in Eq. (30) is not satisfied in the case of gaps. In these cases the asymptotic values of a_n and b_n show undamped oscillations^{2,11}.

Terminators which can be applied for studying DOS containing a gap (i.e. for semiconductors) have been studied in Refs. 11-12.

5. APPLICATION TO bcc-Fe

As a concrete physical application for studying the electronic structure of metals we wanted to test the method with bcc-Fe, and with amorphous $\text{Fe}_{80}\text{B}_{20}$ systems¹³.

For the construction of the Hamiltonian we used the first principles formulation of a tight binding Hamiltonian based on the Linear Muffin Tin Orbital Method of Andersen et al^{14,15}.

The calculation of the local DOS at a Fe-atom in bcc-Fe was done using a finite cluster. The Fe-cluster was built using 400-atoms which were fully coordinated up to the second nearest neighbour shell (in total this makes around 1500 atoms).

The positions of the atoms correspond to those of an ideal Fe bcc-crystal, with the experimental lattice parameter of $a = 2.681\text{\AA}$ (i.e., a Wigner Seitz radius of 2.662 a.u.). For the construction of the Hamiltonian $\hat{H}$, we have used the non screened potential parameters¹⁵ corresponding to the Fe-bcc periodic structure with the same lattice parameter (C, E_V, Δ and Q). We have transformed these non screened potential parameters to the screened ones (tight-binding $\bar{C}$ and $\bar{\Delta}$) using the following relations¹⁵:

$$\bar{C} = C - (Q - \bar{Q}) \frac{(C - E_V)^2}{\Delta}, \quad (47)$$

$$\bar{\Delta}^{\frac{1}{2}} = \frac{(\bar{C} - E_V)}{(C - E_V)} \Delta^{\frac{1}{2}}.$$

with $\bar{Q}_s = 0.03485$, $\bar{Q}_p = 0.05303$ and $\bar{Q}_d = 0.010714$.

The tight binding Hamiltonian H is built according to:

$$\hat{H} = \bar{C} + \bar{\Delta}^{\frac{1}{2}} \bar{S} \bar{\Delta}^{\frac{1}{2}}. \quad (48)$$

Here $\bar{S}$ is the screened structure constant matrix¹⁵, (a matrix of range 400×9), and was built by inverting 400 times smaller matrices of range 15×9 , and keeping each time the first line. 15 is the total number of atoms in a small cluster with bcc structure including first and second nearest neighbours, and 9 is the number of orbitals (s-, p- and d-states) per atom considered.

The calculation of the partial DOS was done on the most central Fe-atom in the cluster, using the recursion method described in the preceding sections with the linear terminator extrapolating up to the level 500.

The results for the calculated recursion coefficients using Eqs. (21) and (23) (a_n, b_n) up to $n = 30$ for p-electronic states are shown in Fig. (5).

One sees that after the 14th level the coefficients corresponding to the p_x, p_y and p_z states are different. This fact is due to the lack of cubic symmetry around the central Fe atom in the cluster of 400 particles. This is also reflected for the two kinds of d-states (those with E_g and T_{2g} symmetry) but in this case the surface effects are not so strong before the 17th level, this is because the d-states are more localized than the p- and s-states. For the evaluation of the DOS 7, 9 and 17 pairs of calculated recursion coefficient for the s-, p- and d-states respectively were used for the extrapolation procedure. The results for the partial s, p and d DOS curves are shown in Fig. (6) together with the results obtained for the infinite periodic case using more exact k-space techniques and the same approximation for the Hamiltonian and the lattice parameter¹⁵.

The calculation of the partial NOS gives the following occupation for the s, p and d states ($s=0.83$, $p=0.85$, $d=6.32$ total 8 electrons) and the Fermi energy at $E_F = 0.111$ Ry. The corresponding values for the 'exact' calculation of paramagnetic bcc-Fe, where the f-electronic states were also considered are: $E_F = -0.125$ Ry, $s = 0.633$, $p = 0.751$, $d = 6.528$ and $f = 0.088$.

6. DISCUSSION

Considering that the local DOS at the Fe atom in the bcc cluster was performed using a personal computer, and a finite number of recursion coefficients, the agreement between the 'exact' and approximated DOS curves is excellent.

From the result shown in Fig. (4) it seems that the linear terminator does not work when a gap is present. However if the gap is sufficiently small compared with the total band width, the oscillations of the recursion coefficients are still sinusoidal and a perturbation theory is still valid^{11,16}. However, in order to take into account the oscillations of the coefficients in an efficient way more than 7 pairs of coefficients are needed in our example. More sophisticated terminator have been recently developed by R. Haydock and C. Nex¹².

Despite the shortcoming of the linear terminator when there is a gap, it provides the best way to obtain accurately the band limits and the suppression of spurious oscillations in the DOS curves allow not only to study integrated quantities also but local quantities.

For testing this last point we performed also a more detailed study of the density of states around the Fermi level by calculating the magnetization of the Fe atom. We used the Stoner model with k-independent exchange splittin¹⁷. In this model the selfconsisten condition for a ferromagnetic state is that the integral of the paramagnetic DOS per spin, over an

energy range E around the Fermi energy equals the magnetization m . In this model:

$$\Delta E = mI,$$

where I is the Stoner parameter for Fe ($I \approx 70 \text{ mRy}^{15}$).

In terms of the function $\bar{N}(m)$ which is the average DOS per spin around the Fermi level over a range of m spins selfconsistency requires that.

$$\frac{m}{\Delta E} = \bar{N}(m).$$

Then by plotting $\bar{N}(m)$ as a function of m (the number of unpaired electrons) we see that the Stoner criterium is satisfied when:

$$\bar{N}(m) = \frac{1}{I}.$$

Fig. (7) shows this plot and one can see that the magnetization is $1.99\mu_B$ or $2.10\mu_B$ depending on which density of states we use for the evaluation of $\bar{N}$. Strictly this Stoner model is valid for localized d-electrons¹⁷, but the influence of the s-states is negligible as one can see from the Fig. (6). This is because the s-partial DOS is very small around the Fermi level.

The experimental value for the saturation magnetization of bcc Fe is $2.2\mu_B$ and a full selfconsistent LMTO tight binding calculation including spin polarization gives the value¹⁵ $m=2.18\mu_B$.

This result shows that the recursion method allows to studying magnetic properties. A calculation of the same type for Fe in a cluster with a fcc structure reveals no magnetic moment (i.e the $\bar{N}(m)$ curve lies below I^{-1} for all values of m), so that fcc Fe is a paramagnetic system.

ACKNOWLEDGMENTS

The author is grateful to ICTP (Trieste) for financial support during the 1987 Summer Workshop on Condensed Matter Physics. Specially, the author wishes to thank to Drs. V.R. Velasco and F. Garcia-Moliner for helpful discussions and a critical reading of the manuscript.

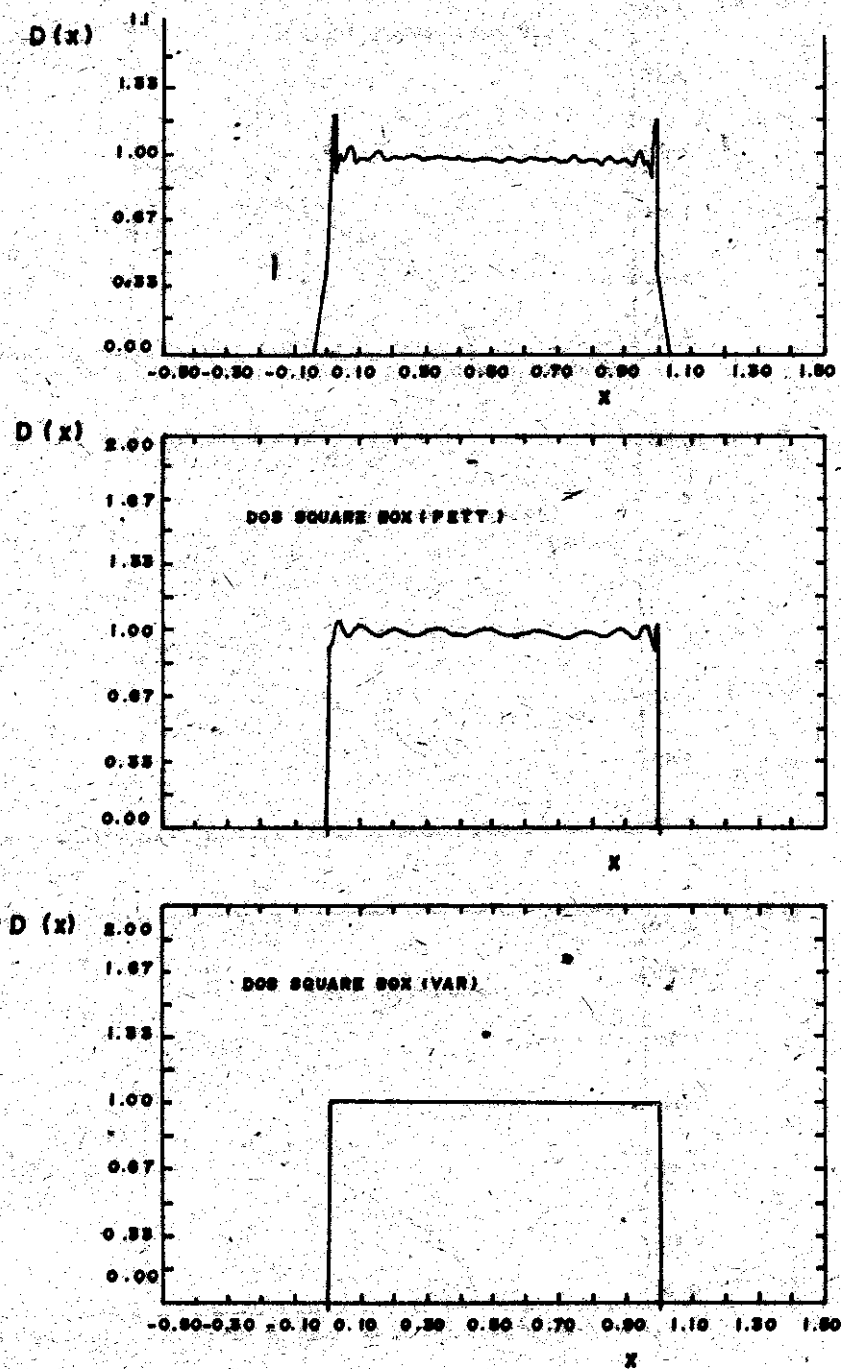


FIG. 1

Reconstruction of the first function of Eq. (46) using the first 7 pairs $\{a_n, b_n\}$ of recursion coefficients and 3 terminators, Nex⁷, Beer-Pettifor⁵ and the one of the present work.

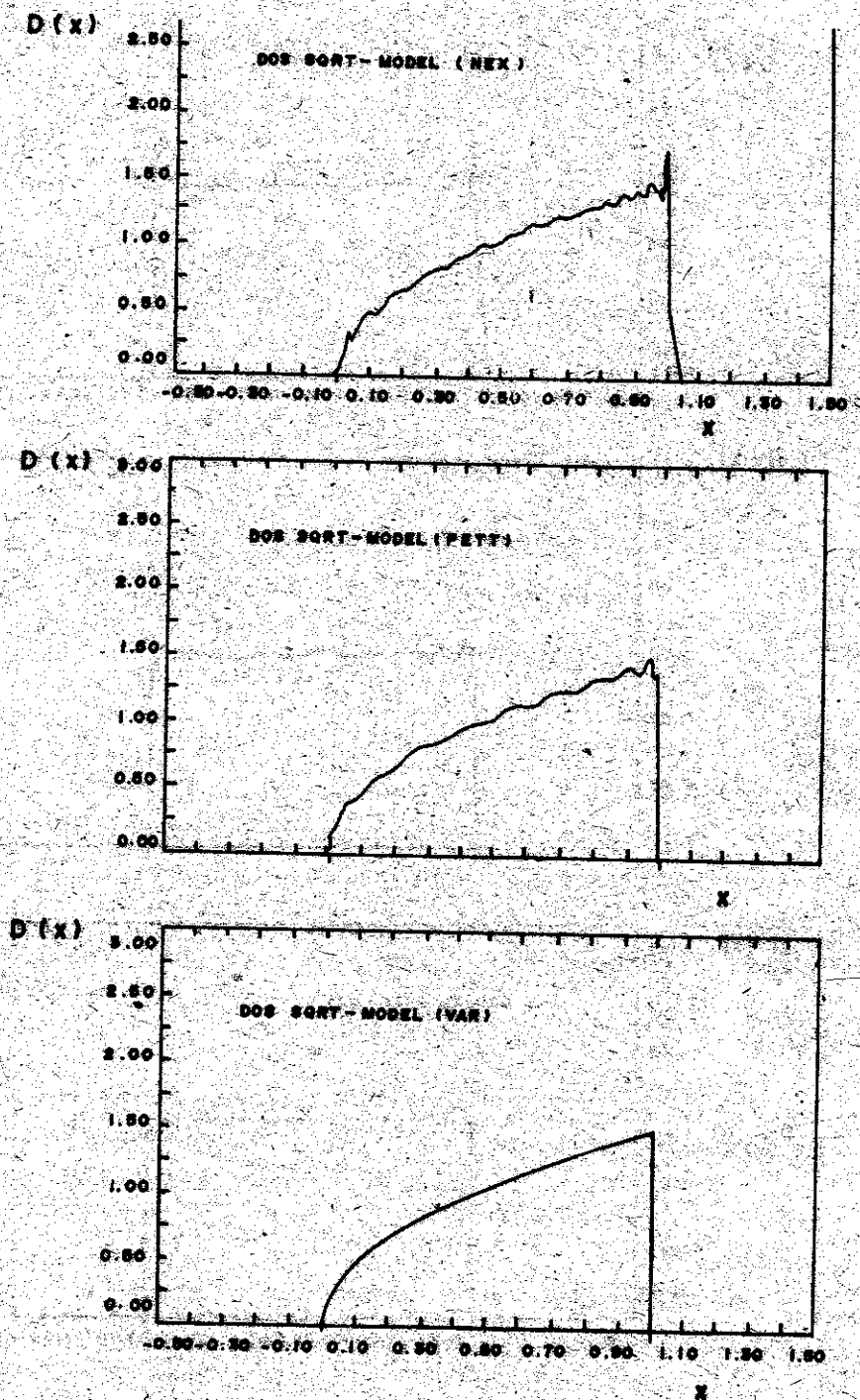


FIG. 2

Same as figure 1*, but with the second function of Eq. (46).

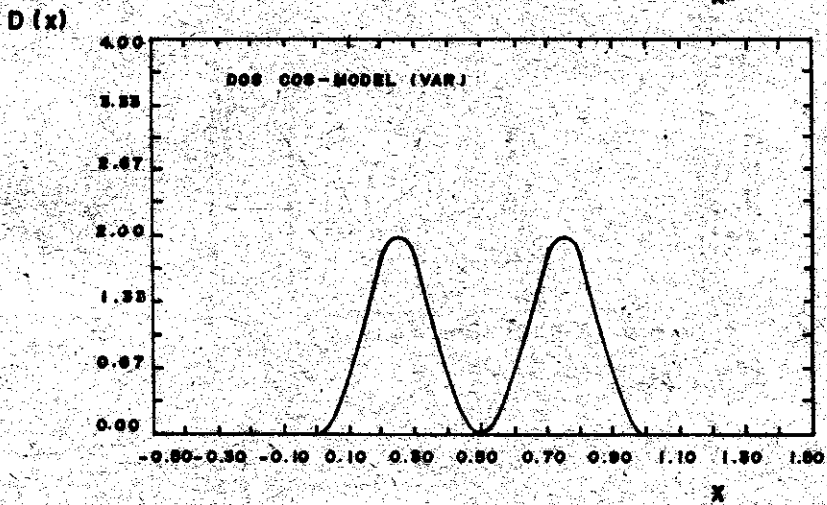
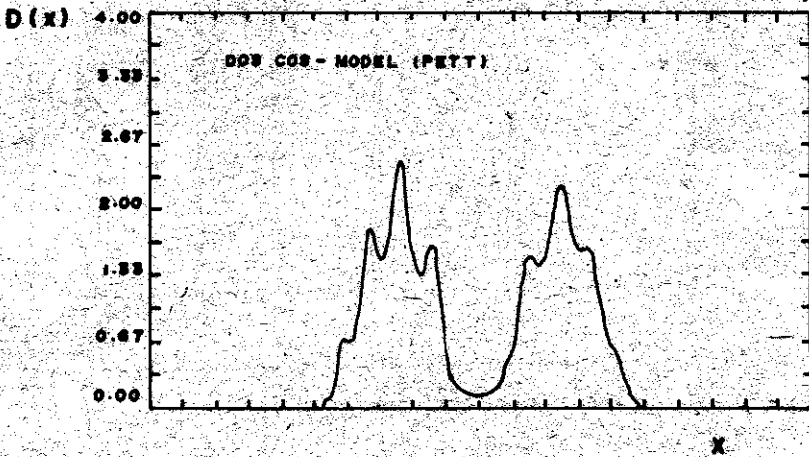
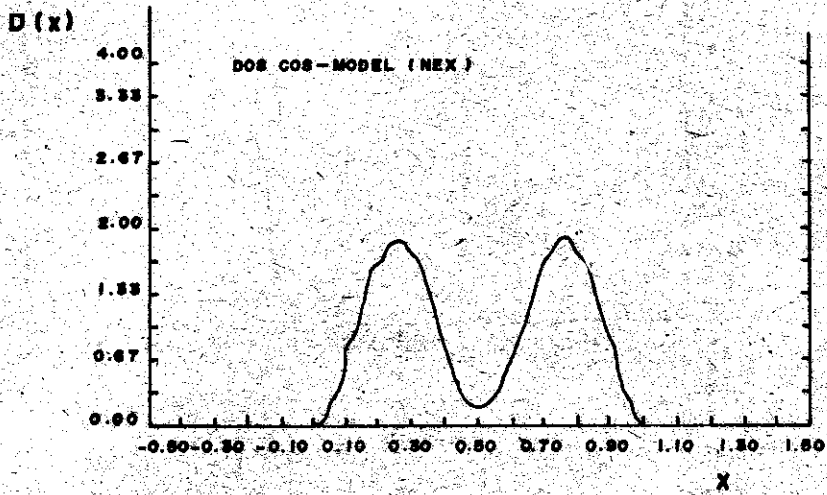


FIG. 3

Same as figure 1, but with the third function of Eq. (46).

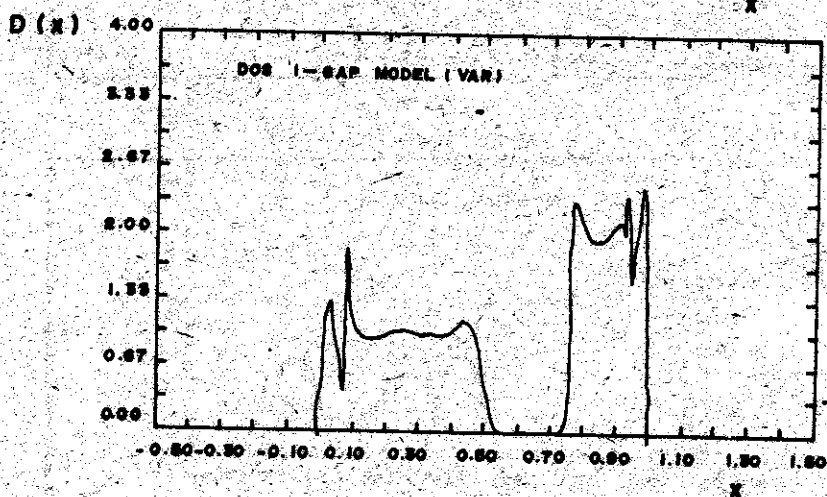
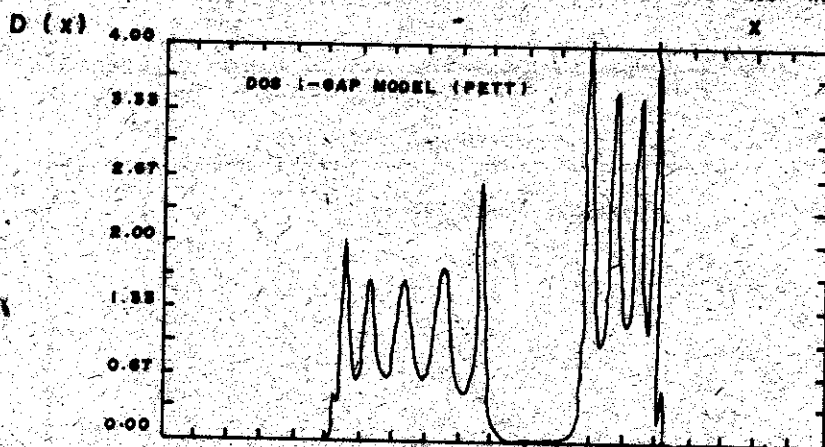
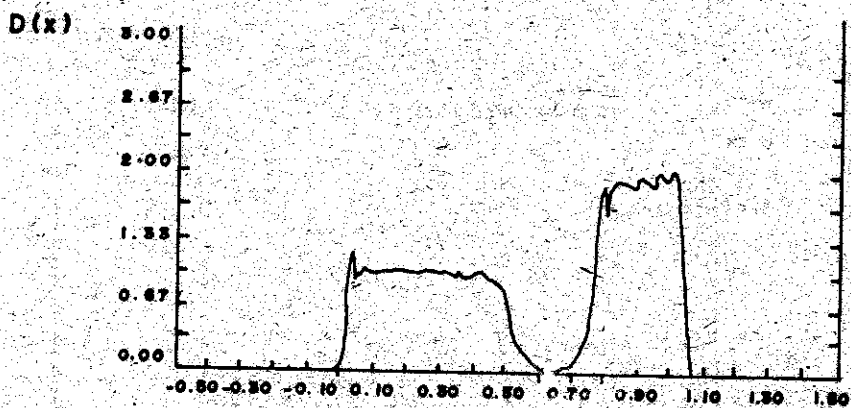


FIG. 4

Same as figure 1, but with the fourth function of Eq. (46)

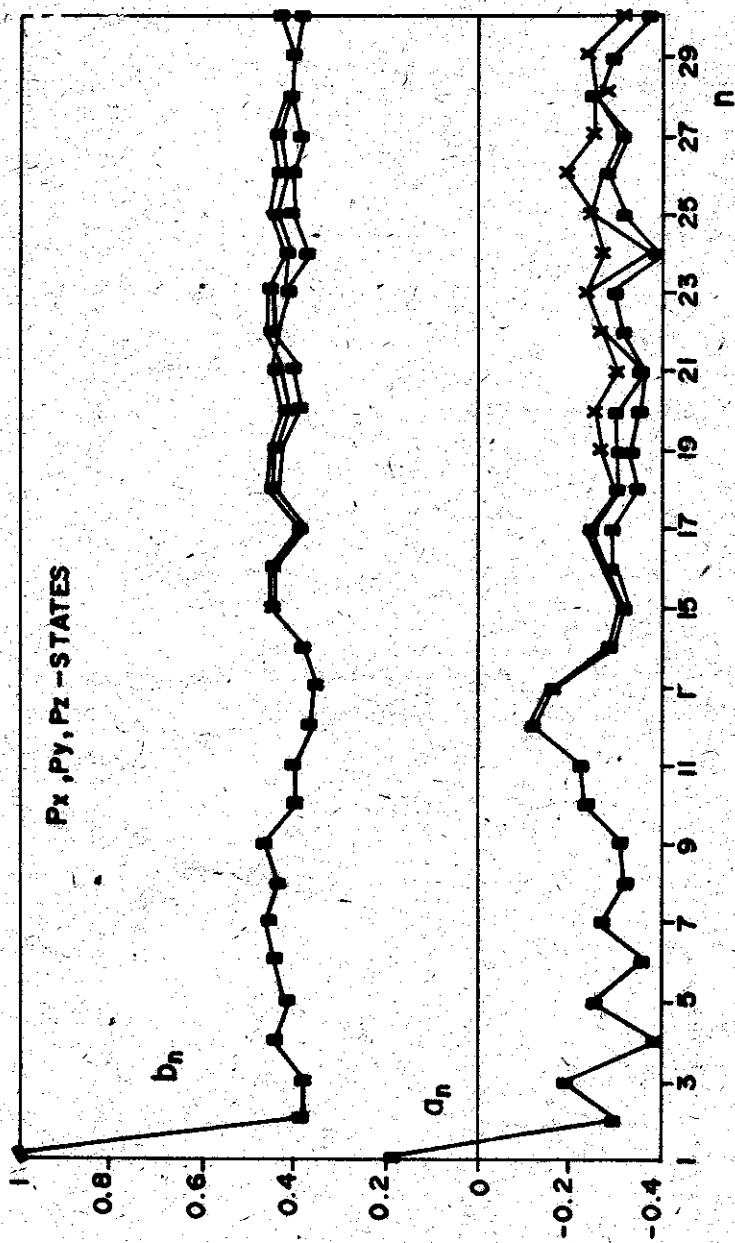


FIG. 5

The a_n and b_n calculated recursion coefficients for the three p -states (p_x , p_y - and p_z - symmetry) of the central Fe-atom in the 400-atom cluster.

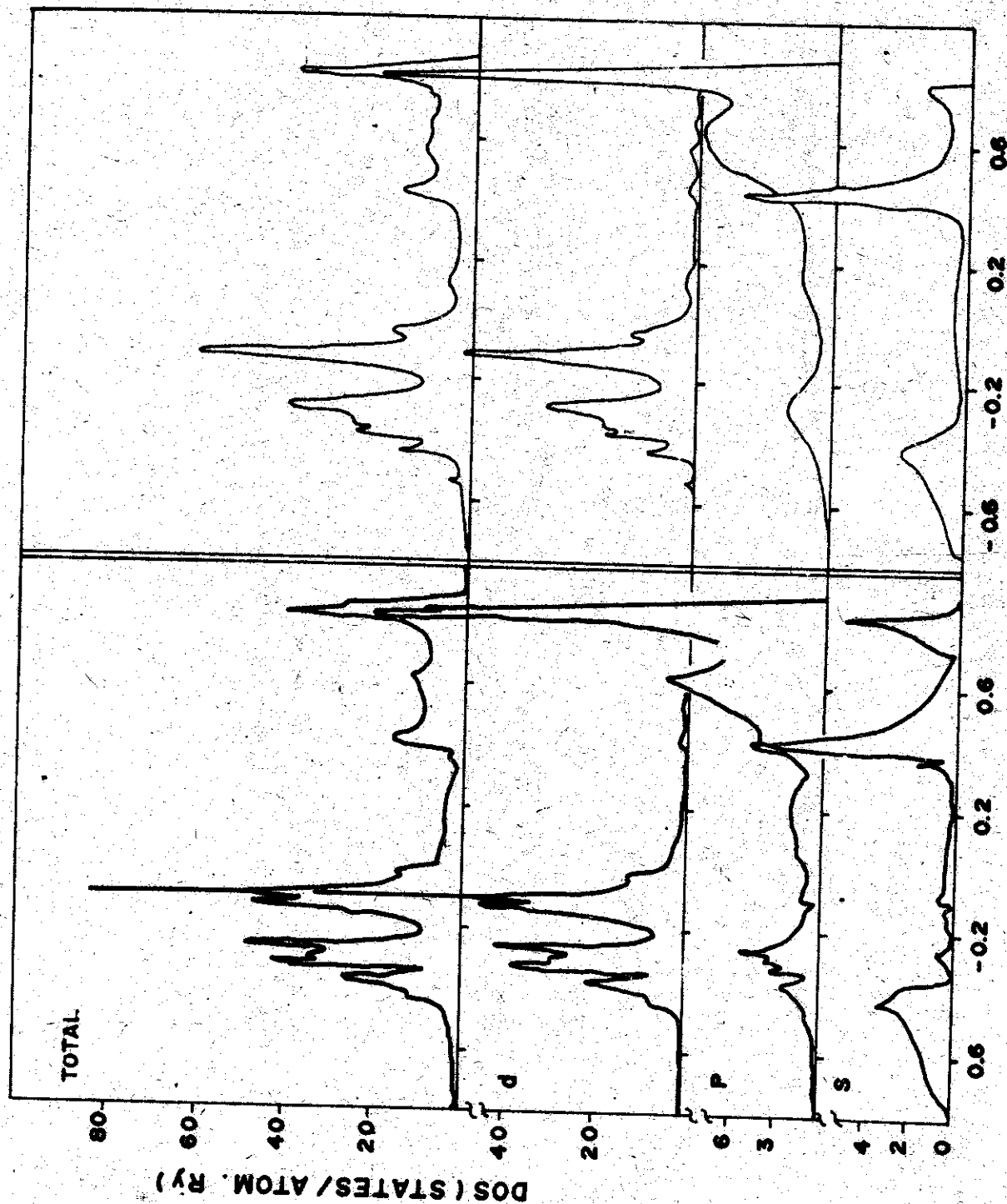


FIG. 6

The local DOS (s, p, d and total DOS) on the most central Fe-atom in the 400-atom cluster with bcc structure, the right pannel shows the results of a LMTO tight binding calculation for the infinite Fe bcc lattice¹⁵.

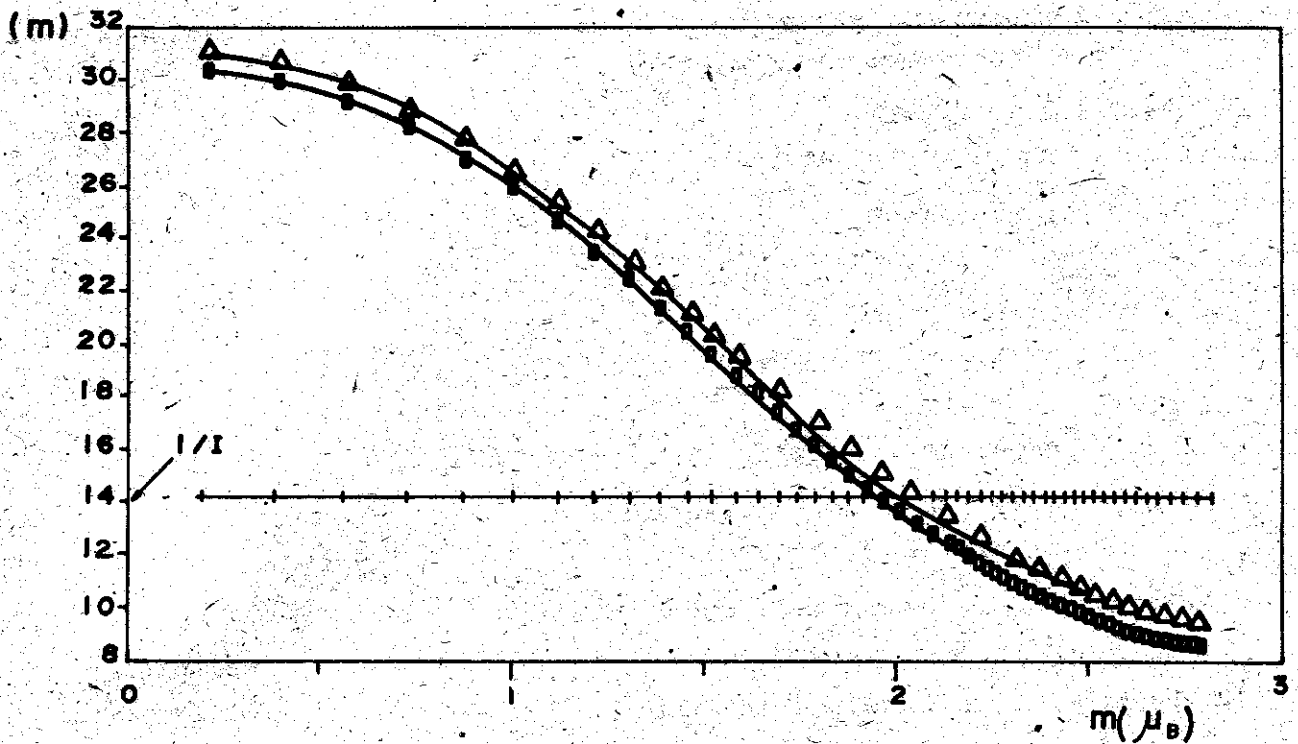


FIG. 7

Stoner plot showing the $N(m)$ and $1/I$ functions as a function of m ($I = 70\text{mRy}$). The intersection of the $N(m)$ function with $1/I$ gives the value of the magnetization m . The upper curve is $N(m)$ calculated with the total DOS, whereas for the lower curve only the d-partial DOS was used.

REFERENCES

1. Wall, H.S. (1948)
Analytical Theory of Continued Fractions, (Toronto, Van Nostrand 1948).
2. Gaspard, J.P. and F. Cyrot-Lackmann (1973)
J. Phys. C. 6, 3077.
3. Lanczos, C. (1950)
J. Res. Nat. Bur. Standards, Sect B45, 255 (Academic Press, New York).
4. Haydock, R. (1980)
In Solid State Physics 35, 129, Eds. H. Ehrenreich, F. Seitz and D. Turnbull.

5. Beer, N. and D.G. Pettifor (1984)
In Electronic Structure of Complex Systems (Eds P. Phariseau and
W.M. Temmerman, Plenum-Press .
6. Nex, C.M.M. (1978)
J. Phys. A. 11, 653.
7. Nex, C.M.M. (1981)
Comp. Phys. Commun. 34, 101.
8. Hodges, C.H. (1977)
J. Physique L187, 38.
9. Allan, G. (1984)
J. Phys. C, 17, 3945.
10. Trias, A.; M. Kiwi and M. Weissmann (1983)
Phys. Rev. B 28, 1859.
11. Turchi, P.; F. Ducastelle and G. Treglia (1982)
J. Phys. C. 15, 2891.
12. Haydock, R. and C.M.M. Nex (1985)
J. Phys. C. 18, 2235.
13. Nowak, H.J.; T. Fujiwara; O.K. Andersen, O. Jepsen and P. Vargas
To be published.
14. Andersen, O.K. and O. Jepsen (1984)
Phys. Rev. Lett. 53, 2571.
15. Andersen, O.K.; O. Jepsen and D. Gloetzel (1985)
"Canonical Description of the Band Structure of Metals" (Reprinted
from Highlights of Condensed Matter Theory, LXXXIX Corso,
Soc. Italiana di Fisica, Bologna-Italy).
16. Bylander, D.M. and J.J. Rehr (1980)
J. Phys. C. 13, 4157.
17. Gunnarsson, O. (1976)
J. Phys. F. 6, 587.