

VIBRACIONES ELÁSTICAS DE NANOPARTÍCULAS DE BISMUTO Y ZIRCONIA

Michel Picquart*, Juan Hernández-Rosas y Emanuel Haro-Poniatowski
Universidad Autónoma Metropolitana Iztapalapa, Departamento de Física, México D.F., México
Michel Jouanneb, Jean-François Morhangeb y Makoto Kanehisab
Université Pierre et Marie Curie, LMDH, Paris Cedex 05, France

RESUMEN

Se presentan las vibraciones acústicas de baja frecuencia, obtenidas mediante espectroscopia Raman en nanopartículas de bismuto y zirconia. Se utilizó un modelo elástico simple para analizar los resultados observados. El modelo es confrontado con los resultados experimentales.

ABSTRACT

Low frequency acoustic vibrations have been observed by Raman spectroscopy in nanoparticles of bismuto and zirconia. A simple elastic model has been used to give account for the observed results. In this work this model is checked against experimental results.

INTRODUCCIÓN

Los nanocristales (NCS) atraen actualmente mucho interés por sus propiedades específicas debidas al confinamiento cuántico. Por ejemplo, los NCS de silicio poseen una emisión de luz en el visible [1], NCS metálicos y semiconductores en una matriz dieléctrica poseen propiedades ópticas no lineales [2-4]. Los NCS son también muy utilizados como soportes catalíticos por su gran razón superficie volumen [5]. Los NCS pueden ser preparados de diversas formas: reacciones químicas, implantación iónica, procesos sol-gel y ablación láser.

La dispersión Raman es una técnica adecuada para el estudio de sistemas de tamaño nanométrico que muestran propiedades características debido al confinamiento de los electrones y huecos pero también de los fonones. Las vibraciones elásticas de una esfera, sin esfuerzo en la superficie, fueron calculados hace más de un siglo por Jaerisch [6], Lamb [7] y Love [8]. Más, recientemente este problema fue resuelto por Torres del Castillo [9] usando operadores de espín. En los últimos años, varios trabajos han comparado las frecuencias teóricas con los datos experimentales, en el caso de nanopartículas esféricas [10-15].

En este trabajo comparamos medidas experimentales de dispersión Raman de NCS de bismuto y de zirconia con un modelo en el cual se hace una aproximación de cuerpo elástico homogéneo y que toma en cuenta la forma oblata de los NCS de bismuto y esférica de los NCS de zirconia.

MATERIALES Y MÉTODOS

Las nanopartículas de zirconia se prepararon por hidrólisis de una solución de $ZrOCl_2$ 0.5 M con NH_4OH (28%) hasta que el pH llegó a 10. Después se lavó el precipitado con una solución de NH_4OH a pH 10. Se seca en aire a 383 K durante 15 horas. Finalmente se hace el recocido a la temperatura deseada durante 1 hora en aire.

Las nanopartículas de bismuto se obtuvieron en películas delgadas preparadas por ablación láser con un láser de excímero a 193 nm, con una frecuencia de 5 Hz y una densidad de energía media de 2 J cm^{-2} . Se depositaron en vacío sobre sustratos de Si(100) a temperatura ambiente en una matriz de Ge. Para incrementar la señal, se depositaron 5 capas alternadas de Bi y Ge terminando con una capa de Ge para evitar la oxidación. Esto se hizo con pulsos de 12 a 200 sobre el blanco de Bi y 100 pulsos sobre el blanco de Ge.

Las mediciones de espectroscopia Raman fueron efectuadas a temperatura ambiente en vacío (10^{-3} Torr) para suprimir la señal Raman de baja frecuencia, debido a los modos de rotación de las moléculas de N_2 y O_2 del aire. Se utilizó un monocromador doble Jobin Yvon U1000 y la línea 514.5 nm de un láser de Argón (Spectra Physics) a una potencia de 5 mW. Los espectros Raman se tomaron directamente del polvo de zirconia depositado en láminas de vidrio. En el caso del bismuto los espectros se hicieron directamente a partir de las capas delgadas.

Para encontrar la forma real de las bandas, los espectros se dividieron por el factor de Bose Einstein. La intensidad del espectro Raman puede ser escrita por [15]:

$$I(\omega) = \left(n\left(\frac{\eta\omega}{kT}\right) + 1 \right) R(\omega) \quad (1)$$

La función espectral $R(\omega)$ es la parte imaginaria de la función de Green retardada [11]:

$$R(\omega) = AT \left\{ \frac{1}{(\omega + i\Gamma)^2 - \omega_0^2} \right\} = \frac{2A\omega\Gamma}{(\omega^2 - \omega_0^2 - \Gamma^2)^2 + 4\omega^2\Gamma^2} \quad (2)$$

donde $T\{\}$ representa la parte imaginaria. Esta expresión es idéntica a la función de respuesta usual de un oscilador amortiguado [15], si se hace la sustitución:

$$\omega_0^2 + \Gamma^2 \rightarrow \omega_0^2 \quad 2\Gamma \rightarrow \Gamma.$$

Por las propiedades de simetría de la función de Bose Einstein $n(-x) + 1 = -n(x)$ y la paridad impar de $R(\omega)$, la ecuación (1) describe a la vez la parte Stokes y la parte anti-Stokes del espectro. La forma de banda dada por la ecuación (2) es idéntica a una lorentziana cuando ω_0 es grande y Γ pequeño, lo que no ocurre cuando la frecuencia de la luz difundida se sitúa en la proximidad de la línea Rayleigh. Hay que notar que ω_0 no es exactamente la frecuencia aparente del máximo de la banda y Γ tampoco es el ancho.

Un fondo débil y ancho de luminiscencia se observa después de la irradiación láser inicial, siendo diferente a los picos estrechos de luminiscencia, observados a energías más bajas [17]. La intensidad de esta banda decrece durante la irradiación y se estabiliza después de una decena de horas. La banda residual fue sustraída del espectro y la calidad de la sustracción fue controlada por la simetría de las componentes Stokes y anti-Stokes del espectro después de la reducción por el factor de Bose-Einstein.

TEORÍA

1.1. Ecuación de ondas elásticas

La ecuación que describe la propagación de ondas acústicas en un medio elástico isotrópico es [18]:

$$\mu \nabla^2 \mathbf{u} + (\lambda + \mu) \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) = \rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} \quad (1)$$

donde $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ es el desplazamiento desde la posición de equilibrio, λ y μ son los coeficientes de Lamé y ρ la densidad. Su solución cumple la forma:

$$\mathbf{u} = \nabla\phi + \nabla \times \mathbf{A} \quad (2a)$$

con

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = 0. \quad (2b)$$

El movimiento de partículas asociado con ϕ es en la dirección de las ondas longitudinales, el asociado con \mathbf{A} es ortogonal a la dirección de propagación, ambas funciones juegan el papel de potenciales. Sustituyendo (2a) en (1) es fácil verificar que ϕ y \mathbf{A} obedecen las ecuaciones de onda:

$$C_L^2 \nabla^2 \phi = \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} \quad C_T^2 \nabla^2 \mathbf{A} = \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} \quad (3)$$

C_L y C_T son las velocidades longitudinal y transversal del sonido que definidas en términos de los coeficientes de Lamé y la densidad ρ están dadas por:

$$C_L = \sqrt{\frac{\lambda + 2\mu}{\rho}} \quad C_T = \sqrt{\frac{\mu}{\rho}}. \quad (4)$$

Suponiendo una dependencia armónica en el tiempo, la ecuación de onda en ϕ se convierte en la ecuación escalar de Helmholtz y la ecuación de ondas en \mathbf{A} se convierte en la ecuación vectorial de Helmholtz, a saber:

$$\nabla^2 \phi + k_L^2 \phi = 0 \quad \text{con} \quad k_L = \frac{\omega}{C_L} \quad (5a)$$

$$\nabla^2 \mathbf{A} + k_T^2 \mathbf{A} = 0 \quad \text{con} \quad k_T = \frac{\omega}{C_T} \quad (5b)$$

Estas ecuaciones diferenciales pueden resolverse por el método de separación de variables en once y seis sistemas de coordenadas respectivamente [19]. En ambas ecuaciones, es posible la separación de variables en coordenadas rectangulares, esféricas y cilíndricas, pero en coordenadas esferoidales oblatas y prolatas sólo es posible la separación de la ecuación escalar de Helmholtz.

Como condición a la frontera en la solución de la ecuación de ondas elásticas se utiliza la expresión del tensor de esfuerzos σ_{ik} especificado por:

$$\sigma_{ik} = \lambda_{,i} \delta_{ik} + 2\mu u_{,ik} \quad (6)$$

donde $u_{,ik}$ es el tensor de deformación dado por

$$u_{ii} = \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{u_i}{\sqrt{h_{ii}}} + \frac{1}{h_{ii}} \sum_{k=1}^3 \frac{\partial h_{ii}}{\partial x_k} \frac{u_k}{\sqrt{h_{kk}}} \quad (7a)$$

y

$$u_{ik} = \frac{1}{2\sqrt{h_{ii}h_{kk}}} \times \left[h_{ii} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{u_i}{\sqrt{h_{ii}}} \right) + h_{kk} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{u_k}{\sqrt{h_{kk}}} \right) \right] \quad i \neq k \quad (7b)$$

Los h_{ii} representan los factores de escala en el sistema de coordenadas utilizado. El tensor de esfuerzos se anula en la frontera siendo el caso de oscilaciones libres para un valor del radio R.

A la proyección del tensor de esfuerzos sobre el vector normal $\hat{\mathbf{n}}$ a la superficie $s = S$ se le denomina la fuerza o tracción \mathbf{F} . Así, para oscilaciones libres, las tracciones o fuerzas se anulan en la frontera:

$$\mathbf{F}_{s=S} = \bar{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{n}} \Big|_{s=S} = 0. \quad (8)$$

Además de esta condición, se requiere que las funciones sean finitas en el origen para los sistemas coordenados que estudiaremos.

1.2. Modos normales de vibración de esferas

Las vibraciones de esferas elásticas han sido estudiadas por Jaerisch [6], Lamb [7] y Love [8]. Torres del Castillo ha resuelto la ecuación de ondas elásticas para el caso esférico utilizando operadores de espín [9]. Sin embargo, con su método establece claramente que el vector \mathbf{u} puede escribirse como una componente longitudinal y dos transversales:

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_L + \mathbf{u}_{T1} + \mathbf{u}_{T2} \quad (9)$$

El caso esférico está bien entendido, los modos normales pueden ser separados como torsionales y esferoidales [19]. Los modos torsionales están representados por \mathbf{u}_{T1} , los modos esferoidales están formados por una combinación lineal de \mathbf{u}_L con \mathbf{u}_{T2} y se escriben, en coordenadas esféricas:

$$\mathbf{u}_L = \frac{1}{k_L r} \left[\hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{e}^{i\mathbf{m}\phi} P_m(\cos\theta) \frac{d}{dr} j_l(k_L r) + \left(\hat{\boldsymbol{\theta}} \frac{\partial}{\partial \theta} Y_{ml}(\theta, \varphi) + \frac{\hat{\boldsymbol{\phi}}}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} Y_{ml}(\theta, \varphi) \right) j_l(k_L r) \right] \quad (10a)$$

$$\mathbf{u}_{T1} = \left(\hat{\boldsymbol{\theta}} \frac{\partial}{\partial \theta} Y_{ml}(\theta, \varphi) - \frac{\hat{\boldsymbol{\phi}}}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} Y_{ml}(\theta, \varphi) \right) j_l(k_L r) \quad (10b)$$

$$\mathbf{u}_{T2} = \frac{1}{k_T r} \left[l(l+1) \hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{e}^{i\mathbf{m}\phi} P_m(\cos\theta) j_l(k_T r) + \left(\hat{\boldsymbol{\theta}} \frac{\partial}{\partial \theta} Y_{ml}(\theta, \varphi) + \frac{\hat{\boldsymbol{\phi}}}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} Y_{ml}(\theta, \varphi) \right) \frac{d}{dr} (r j_l(k_T r)) \right] \quad (10c)$$

donde $Y_{ml}(\theta, \varphi)$ y $j_l(kr)$ son los armónicos esféricos y las funciones esféricas de Bessel, respectivamente.

Al resolver las ecuaciones de Helmholtz, escalar y vectorial, expresadas en coordenadas esféricas y aplicar a las soluciones las condiciones de frontera, uno obtiene dos ecuaciones de valores propios. Para que este sistema de ecuaciones sea consistente, su determinante se debe anular, de éste se deducen, las ecuaciones trascendentales para los modos torsionales:

$$\frac{d}{d\beta} \left(\frac{j_l(\beta)}{\beta} \right) = 0 \quad (l \geq 1), \text{ es el momento angular} \quad (11)$$

y para los modos esferoidales:

$$2 \left[\beta^2 + (l-1)(l+2) \left\{ \beta \frac{j_{l+1}(\beta)}{j_l(\beta)} - (l+1) \right\} \right] \alpha \frac{j_{l+1}(\alpha)}{j_l(\alpha)} - \frac{1}{2} \beta^4 + (l-1)(2l+1) \beta^2 + \left\{ \beta^2 - 2l(l-1)(l+2) \right\} \beta \frac{j_{l+1}(\beta)}{j_l(\beta)} = 0 \quad (12)$$

donde α y β están dadas por

$$\alpha = \frac{\omega R}{C_L}, \quad \beta = \frac{\omega R}{C_T} \quad (13)$$

donde ω es la frecuencia obtenida después que en ambas ecuaciones trascendentales se ha obtenido α o β .

La ecuación de los modos esferoidales para $l = 0$ representa a modos radiales esféricamente simétricos y la ecuación trascendental de autovalores resulta en:

$$j_2(\alpha) = \left[\frac{3}{4} \left(\frac{C_L}{C_T} \right)^2 - 1 \right] j_0(\alpha) \quad (14)$$

1.3. Modos normales de vibración de esferoides oblatos

Para esferoides elásticos, la resolución de la ecuación de ondas elásticas tiene como inconveniente que al dividirla en las ecuaciones escalar y vectorial de Helmholtz (5), es imposible la separabilidad de la segunda ecuación en coordenadas oblatas. Sin embargo, Eringen y Suhubi sostienen que para el caso axisimétrico es posible la separabilidad dado que la ecuación vectorial se transforma en una ecuación escalar [21].

Las coordenadas cartesianas están relacionadas con las coordenadas esferoidales oblatas por [22]:

$$\begin{aligned} x &= f [(\xi^2 + 1)(1 - \eta^2)]^{1/2} \cos \varphi \\ y &= f [(\xi^2 + 1)(1 - \eta^2)]^{1/2} \sin \varphi \\ z &= f \xi \eta \end{aligned} \quad (15)$$

siendo ξ , η y φ las coordenadas esferoidales oblatas, y f la distancia focal. El rango de las variables está dado por:

$$0 < \xi < \infty, \quad -1 \leq \eta \leq 1, \quad 0 \leq \varphi \leq \pi.$$

En el sistema de coordenadas oblatas (Figura 1), un esferoide oblato de coordenada constante $\xi = X$ se describe con la ecuación:

$$\frac{x^2 + y^2}{f^2(\xi^2 + 1)} + \frac{z^2}{f^2\xi^2} = 1. \quad (16)$$

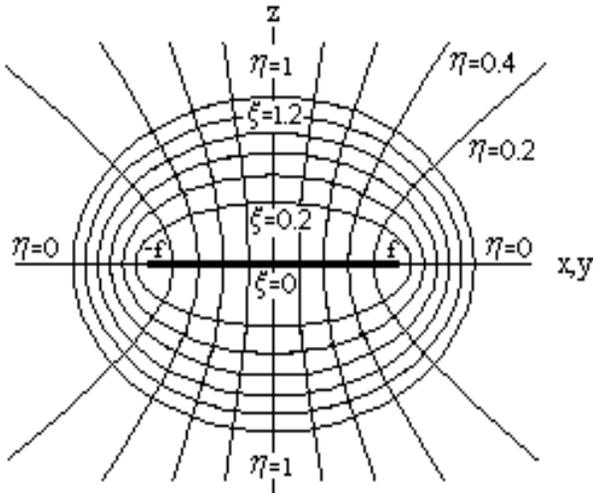


Figura 1. El sistema coordenado oblato se forma al girar un sistema de coordenadas elípticas alrededor del semi-eje menor de las elipses confocales.

En este tipo de coordenadas, la ecuación escalar de Helmholtz está dada por:

$$\begin{aligned} \frac{1}{f^2(\xi^2 + \eta^2)} \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left((\xi^2 + 1) \frac{\partial}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left((1 - \eta^2) \frac{\partial}{\partial \eta} \right) + \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{\xi^2 + \eta^2}{(\xi^2 + 1)(1 - \eta^2)} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right] \phi + k_L^2 \phi = 0 \end{aligned} \quad (17)$$

y considerando un potencial axisimétrico, esto es: $\mathbf{A} = A\varphi(\xi, \eta) \hat{\varphi}$ [21], donde $\hat{\varphi}$ es el vector unitario en la dirección de la coordenada φ , la ecuación vectorial se reduce a:

$$\begin{aligned} (\xi^2 + 1)^{1/2} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} \left((\xi^2 + 1)^{1/2} A_\varphi \right) + (1 - \eta^2)^{1/2} \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} \left((1 - \eta^2)^{1/2} A_\varphi \right) + h_T^2 (\xi^2 + \eta^2) A_\varphi = 0 \end{aligned} \quad (18)$$

en analogía a la expresión de Rand para coordenadas esferoidales prolatas [23], siendo h_T el producto de f por k_T . Considerando una situación semejante para ϕ , es decir $\phi = \phi(\xi, \eta)$ la ecuación (17) se reducirá a:

$$\left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left((\xi^2 + 1) \frac{\partial}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left((1 - \eta^2) \frac{\partial}{\partial \eta} \right) \right] \phi + h_L^2 (\xi^2 + \eta^2) \phi = 0 \quad (19)$$

siendo h_L el producto de f por k_L . Tenemos que las ecuaciones (18) y (19) se pueden resolver por separación de variables, a saber:

$$A_\varphi = R_{ml}(ih, -i\xi) S_{ml}(ih, \eta), \quad m = 1, \quad (20a)$$

$$\phi = R_{ml}(ih, -i\xi) S_{ml}(ih, \eta), \quad m = 0. \quad (20b)$$

De igual modo que en (9), al vector \mathbf{u} lo escribimos en términos de una componente longitudinal y dos transversales:

$$\mathbf{u}_L = \nabla \phi = \nabla [R_{ml}(ih_L, -i\xi) S_{ml}(ih_L, \eta)] \quad m = 0 \quad (21a)$$

$$\mathbf{u}_{T1} = \nabla \times \mathbf{A} = \nabla \times [R_{ml}(ih_T, -i\xi) S_{ml}(ih_T, \eta) \hat{\varphi}] \quad m = 1 \quad (21b)$$

$$\mathbf{u}_{T2} = \frac{1}{k_T^2} \nabla \times \nabla \times \mathbf{A} = R_{ml}(ih_T, -i\xi) S_{ml}(ih_T, \eta) \hat{\varphi} \quad m = 1 \quad (21c)$$

donde \mathbf{u}_{T2} es la solución análoga a la presentada por Rand del caso prolato [23]. En estas expresiones, la función "angular" esferoidal está dada por:

$$S_{ml} = \sum_{r=0,1}^{\infty} d_r^{ml} (-ih) P_{m+r}^m(\eta) \quad (22)$$

y la función "radial" esferoidal por:

$$R_{ml}(ih, i\xi) \frac{(l-m)! \left(\frac{\xi^2 + 1}{\xi^2} \right)^{\frac{m}{2}}}{(l+m)!} \sum_{r=0,1}^{\infty} \frac{(2m+r)!}{r!} i^{r+m-l} d_r^{ml} (-ih) j_{m+r}(h\xi) \quad (23)$$

donde $P_{m+r}^m(\eta)$ son los polinomios asociados de Legendre y $j_l(h\xi)$ son las funciones esféricas de Bessel. La suma incluye valores pares de r si $(l-m)$ es par o incluye valores impares si $(l-m)$ es impar; además, para un valor dado de m , l debe ser siempre mayor o igual a m . La fórmula que relaciona a los coeficientes sucesivos d_r^{ml} de la ecuación (23) es

$$a_r d_{r+2}^{ml} + (\beta_r - \lambda_{ml}) d_r^{ml} + \gamma_r d_{r-2}^{ml} = 0 \quad (24)$$

donde

$$\alpha_r = \frac{(2m+r+2)(2m+r+1)h^2}{(2m+2r+3)(2m+2r+5)},$$

$$\gamma_r = \frac{r(r-1)h^2}{(2m+2r-3)(2m+2r-1)},$$

$$\beta_r = (m+r)(m+r+1) - \frac{2(m+r)(m+r+1) - 2m^2 - 1}{(2m+2r-1)(2m+2r+3)} h^2. \quad (25)$$

y λ_{ml} es una función de $-ih$, esta sirve de constante de separación en las ecuaciones (18) y (19); al mismo tiempo, juega el papel de autovalor. Con el objeto de obtener los coeficientes d_r , se utilizó el método matricial sugerido por Aquino et al. [24], porque permite cambiar el tamaño de la matriz de acuerdo al rango de h requerido para calcular las soluciones.

Haciendo uso de la ecuación (8), las tracciones o fuerzas deben ser nulas para oscilaciones libres en un esferoide oblató sobre su superficie en $\xi = X$.

$$\mathbf{F}_{\xi=X} = \bar{\sigma} \cdot \hat{\xi} \Big|_{\xi=X} = \hat{\xi} \lambda \bar{\mathbf{u}} \cdot \Big|_{\xi=X} + \hat{\xi} \frac{2\mu}{f} \left(\frac{\xi^2 + 1}{\xi^2 + \eta^2} \right)^{\frac{1}{2}}$$

$$\left(\frac{\partial u_\xi}{\partial \xi} + \left(\frac{1-\eta^2}{\xi^2 + 1} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\eta u_\eta}{\xi^2 + \eta^2} \right) \Big|_{\xi=X}$$

$$+ \hat{\eta} \frac{\mu}{f} \left\{ \left(\frac{\xi^2 + 1}{\xi^2 + \eta^2} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\partial u_\eta}{\partial \xi} - \left(\frac{1-\eta^2}{\xi^2 + 1} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\eta u_\xi}{\xi^2 + \eta^2} \right) \right\} +$$

$$+ \left(\frac{1-\eta^2}{\xi^2 + \eta^2} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\partial u_\xi}{\partial \eta} - \left(\frac{\xi^2 + 1}{1-\eta^2} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\xi u_\eta}{\xi^2 + \eta^2} \right) \Big|_{\xi=X}$$

$$+ \hat{\phi} \frac{\mu}{f} \left\{ \left(\frac{\xi^2 + 1}{\xi^2 + \eta^2} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\partial u_\phi}{\partial \xi} + \frac{\xi}{(\xi^2 + 1)^{\frac{1}{2}} (1-\eta^2)^{\frac{1}{2}}} \right.$$

$$\left. \left(\frac{\partial u_\xi}{\partial \phi} - \left(\frac{1-\eta^2}{\xi^2 + \eta^2} \right)^{\frac{1}{2}} \xi u_\phi \right) \right\} \Big|_{\xi=X} = 0 \quad (26)$$

Sustituyendo en esta última ecuación las expresiones dadas en (21) para u_L , u_{T1} , u_{T2} , obtenemos el sistema de ecuaciones:

$$- \hat{\xi} \lambda h_L^2 \phi \Big|_{\xi=X} + 2\mu \hat{\xi} \left\{ \frac{\xi^2 + 1}{\xi^2 + \eta^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi^2} - \frac{\xi(1-\eta^2)}{(\xi^2 + \eta^2)^2} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} + \right.$$

$$\left. + \frac{\eta(1-\eta^2)}{(\xi^2 + \eta^2)^2} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right\} \Big|_{\xi=X} + 2\mu \hat{\eta} \frac{(\xi^2 + 1)^{\frac{1}{2}} (1-\eta^2)^{\frac{1}{2}}}{(\xi^2 + \eta^2)^2}$$

$$\left\{ (\xi^2 + \eta^2) \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi \partial \eta} - \xi \frac{\partial \phi}{\partial \eta} - \eta \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right\} \Big|_{\xi=X} = 0 \quad (27a)$$

$$\frac{\hat{\xi}}{\xi^2 + \eta^2} \left(\frac{\xi^2 + 1}{1-\eta^2} \right)^{\frac{1}{2}} \left\{ \frac{\eta(\xi^2 + 1)}{\xi^2 + \eta^2} \frac{\partial A_\phi}{\partial \xi} - \frac{\xi \eta}{\xi^2 + 1} A_\phi \right.$$

$$\left. + \frac{\xi(1-\eta^2)}{\xi^2 + \eta^2} \frac{\partial A_\phi}{\partial \eta} - (1-\eta^2) \frac{\partial^2 A_\phi}{\partial \eta \partial \xi} \right\} \Big|_{\xi=X} +$$

$$+ \hat{\eta} \left\{ \frac{h_T^2}{2} A_\phi - \frac{\xi^2 A_\phi}{(\xi^2 + \eta^2)(\xi^2 + 1)} + \left(\frac{\xi^2 + 1}{\xi^2 + \eta^2} \right) \frac{\partial^2 A_\phi}{\partial \xi^2} - \right.$$

$$\left. \xi \left[\frac{1}{\xi^2 + \eta^2} - \frac{1-\eta^2}{(\xi^2 + \eta^2)^2} \right] \frac{\partial A_\phi}{\partial \xi} - \frac{\eta(1-\eta^2)}{(\xi^2 + \eta^2)^2} \frac{\partial A_\phi}{\partial \eta} \right\} \Big|_{\xi=X} = 0$$

(27b)

$$\hat{\phi} \left\{ \frac{\partial A_\phi}{\partial \xi} - \frac{\xi}{\xi^2 + 1} A_\phi \right\} \Big|_{\xi=X} = 0 \quad (27c)$$

Las dos primeras no se pueden desacoplar y la ecuación trascendente asociada a la componente u_T del desplazamiento, que corresponde a los modos torsionales axisimétricos oblatos, es obtenida directamente de (27c), y es:

$$\frac{X^2 + 1}{X} \frac{d}{dX} R_{||}(ih_T, X) - R_{||}(ih_T, X) = 0 \quad (28)$$

Donde la función angular de A_ϕ ha sido factorizada. Así, la frecuencia está dada por

$$\omega_{\text{oblatos}} = \frac{h_T X}{b} C_T \quad (29)$$

donde h_T ha sido obtenida de las raíces de la ecuación (26) y b es el semieje menor del esferoide oblatos.

La ecuación (28) de autovalores de modos torsionales tiene como límite la ecuación (12) para los modos torsionales de la esfera. Los modos torsionales axisimétricos de la esfera corresponden al autovalor $m = 0$, pero en el caso esferoidal lo son para $m = 1$; además, en el cambio de simetría esférica a esferoidal origina que sea m el número que condicione los valores de l , de acuerdo con las ecuaciones (18) y (20).

RESULTADOS EXPERIMENTALES

En la Figura 2 se presentan los espectros Raman de baja frecuencia del óxido de zirconio con los componentes Stokes y anti-Stokes y la deconvolución de las bandas para diferentes temperaturas, es decir, para diferentes tamaños de nanopartículas.

En la Figura 3 se presentan las frecuencias de los modos de baja frecuencia del óxido de zirconio en función del inverso del radio de las partículas. El tamaño de las partículas se determinó por rayos X [25]. Los valores experimentales fueron comparados con la frecuencia calculada de los dos primeros modos activos en Raman en el caso esférico considerando que oblatos de semieje menor b se asemejan a esferas de radio $b/2$.

En este cálculo fueron tomados para el óxido de zirconio, el módulo de Young $E = 2.44 \cdot 10^{12}$ dinas cm^{-2} y $\mu = 0.97 \cdot 10^{12}$ dinas cm^{-2} , de los cuales se obtuvieron las velocidades del sonido $C_L = 7\,212$ m s^{-1} y $C_T = 4\,122$ m s^{-1} [26].

Hay una concordancia razonable entre los valores experimentales y los calculados si se toma en cuenta la esfericidad no perfecta de estas nanopartículas. La separación entre puntos experimentales y la curva teórica es más notable a medida que el tamaño de las partículas disminuye.

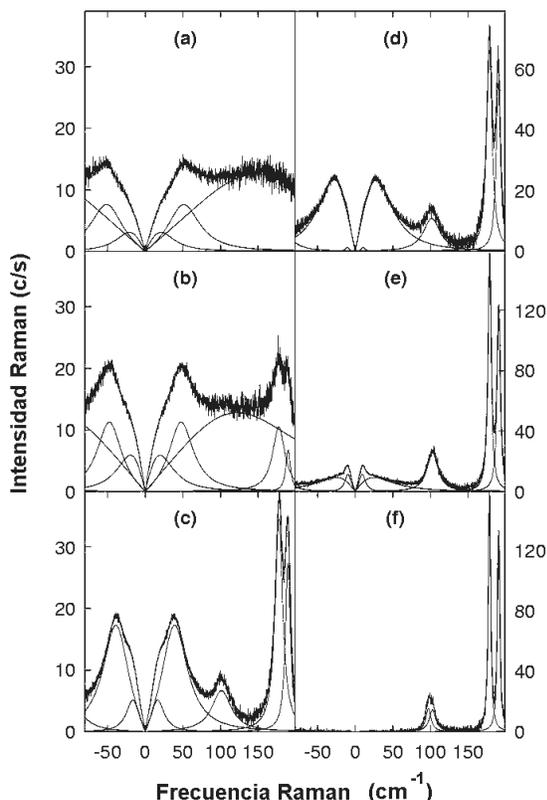


Figura 2. Espectros Raman de baja frecuencia de las muestras de Zirconia y su deconvolución en función de la temperatura 330°C (a), 360°C (b), 400°C (c), 500°C (d), 700°C (e) y, 1000°C (f), es decir para tamaños de nanopartículas decrecientes.

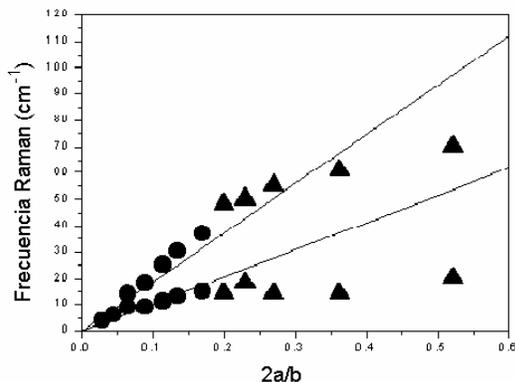


Figura 3. Frecuencia Raman de la zirconia en función del inverso del tamaño reducido. Las dos rectas representan el cálculo usando la ecuación (4).

Tal como lo reportan Haro-Poniatowski et al. [17], las muestras de nanopartículas esferoidales de Bi presentan tres modos de vibración activos en Raman, de los cuales, los modos de mayor frecuencia presentan un corrimiento muy pequeño desde 97.2 hasta 86.8 cm^{-1} y desde 73 hasta 66.2 cm^{-1} conforme el tamaño varía, específicamente con la disminución del tamaño (Figura 4). El modo de más baja frecuencia tiene diferente comportamiento conforme la frecuencia

varía desde 3 hasta 48 cm^{-1} con respecto al semieje b que varía desde 3.09 hasta 0.25 nm. Además, estos mismos autores han realizado dispersión Raman polarizado y han demostrado que este modo no es polarizado, es decir, que el mismo espectro es obtenido, ya sea en polarización paralela o transversal. Lo anterior sirve para justificar que debemos comparar estos resultados experimentales con los cálculos realizados con los modos normales de torsión de esferoides oblatos.

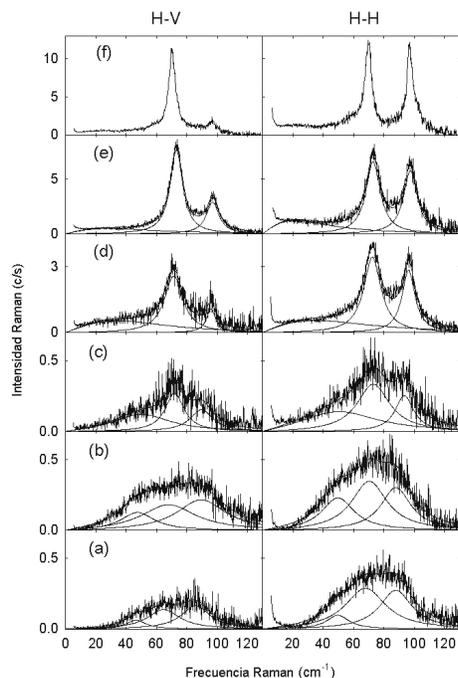


Figura 4. Espectro Raman de baja frecuencia de nanopartículas de Bi en función del tamaño: (a) 2.31 nm, (b) 2.51 nm, (c) 7.63 nm, (d) 17.55 nm, (e) 23.41 nm y, (f) Bi monocristalino en la polarización H-V y H-H, respectivamente.

En la Figura 5 se muestran las frecuencias calculadas en el caso $m = 1, l = 1$ de los modos torsionales de oblatos. Estas curvas han sido hechas manteniendo a constante y variando b hasta el límite esférico ($b = a$), el cual está representado como una línea recta. Los valores de a y b están dados como múltiplos de d_{110} , que es la constante de red de la estructura romboédrica del Bi en la dirección $\{110\}$, el valor de la constante de red es de 0.328 nm.

Los valores calculados están dados en la Tabla 1, para $l = 1$ y $m = 1$ en comparación con los resultados experimentales de Raman de baja frecuencia. El parámetro $X = b/f$ es aproximadamente el mismo para casi todos los NCS, excepto para la muestra BG25 que se desvía un poco más del valor promedio. Podemos decir que tenemos NCS que son esferoides cuasi-homotéticos, y eso muestra también la regularidad de crecimiento de los NCS

obtenidos con la técnica de ablación láser. En este modelo no tenemos parámetros de ajuste y podemos considerar que el acuerdo entre los dos valores es satisfactorio.

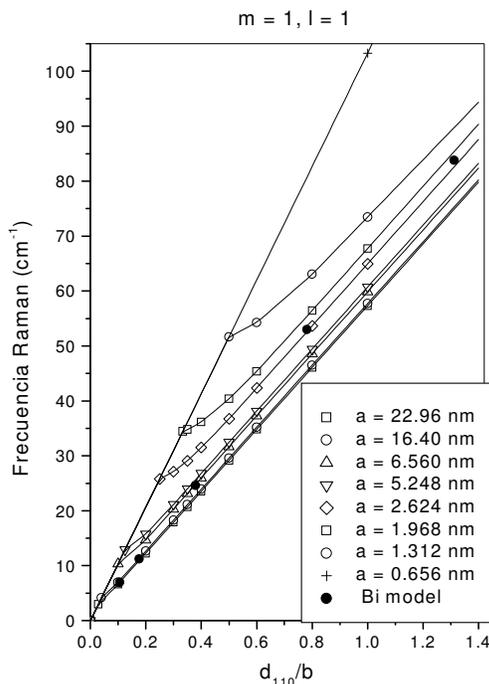


Figura 5. Modo de baja frecuencia de oblatos de bismuto en el caso $m = 1, l = 1$ en función del semi-eje menor (b) para diferentes tamaños (a).

Tabla 1. Comparación de las frecuencias calculadas y experimentales de los modos de baja frecuencia de NC's de bismuto con el modelo de esferoides oblatos.

	Tamaño a (nm) b (nm)	Experimental (cm^{-1})	Calculada (cm^{-1})
BG12	1.15	48	83.8
	0.25		
BG25	1.25	48	52.9
	0.42		
BG50	3.81	49.6	24.6
	0.865		
BG100	8.75	17.0	11.2
	1.865		
BG200	11.7	3.1	6.9
	3.09		

CONCLUSIÓN

La dispersión Raman de baja frecuencia de NCS de óxido de zirconio y de bismuto muestra una fuerte dependencia con el tamaño de las partículas. Las frecuencias calculadas con un modelo elástico de

esferas u oblatos concuerdan con las experimentales. Se calcularon las frecuencias de modos torsionales de esferoides cuyos valores de a y b son del orden de magnitud de nanocristales de Bi sin usar parámetros libres [25]. El modelo elástico utilizado da una concor-

dancia aceptable para las nanopartículas más grandes, pero falla para las pequeñas; de hecho, las muestras BG25 y BG12 sólo poseen tres y dos planos atómicos respectivamente, por lo que un modelo de planos atómicos podría ser más razonable.

REFERENCIAS

- SHIMIZU-IWAYAMA, T. **et al.** (1995): **Nanostrut. Mater.** 5, 307.
- FUJII, M.; T. NAGAREDA; S. HAYASHI and K. YAMAMOTO (1991): **Phys. Rev. B** 44, 6243.
- CHAMPAGON, B.; B. ADRIANASOLO and E. DUVAL (1991): **Mater. Sci. Eng. B** 9, 417.
- BALLESTEROS, J.M. **et al.** (1997): **Jr., Appl. Phys. Lett.** 71, 2445.
- MERCERA, P.D.L. (1990): **Appl. Catal.** 57,127.
- JAERISCH, P. (1880): **J.F. Math.** (Crelle) 88, 131-145.
- LAMB, H. (1882): **Proc. Math. Soc. London** 13, 187.
- LOVE, A.E.H. (1944): in **A Treatise on Mathematical Theory of Elasticity** (Dover, New York).
- TORRES del CASTILLO, G.F. (1999): **Rev. Mex. Fis.** 45, 557-564..
- FUJII, M.; T. NAGAREDA, S. HAYASHI and K. YAMAMOTO (1991): **Phys. Rev. B** 44, 6243. [Erratum: **Phys. Rev. B** 52, 14273 (1995)].
- FUJII, M.; W. KANZAWA, S. HAYASHI and K. YAMAMOTO (1996): **Phys. Rev. B** 54, R8373.
- SAVIOT, L.; D.B. MURRAY and M.C. MARCO DE LUCAS (2003): arXiv:cond-mat/0307634 vl.
- PORTALES, H.; L. SAVIOT and E. DUVAL (2002): **Phys. Rev. B**, 65, 165422.
- PORTALES, H. **et al.** (2001): **J. Chem. Phys.** 115, 3444.
- BARKER, A.S. and R. LOUDON (1972): **Rev. Mod. Phys.** 41, 18.
- ABRIKOSOV, A.A.; L.P. GOR'KOV, I.Y. DZIALOSHINSKII (1965): in **Quantum field theoretical methods in statistical physics** (Pergamon, Oxford, 1965).
- ASHER, I.M.; B. PAPANICOLAOU, E. ANASTASSAKIS (1976): **J. Phys. Chem. Solids** 37, 221.
- LANDAU, L.L. and E.M. LIFSHITZ (1989): **Theory of Elasticity**, Third Ed., Pergamon Press, Oxford.
- MORSE, R.M. and H. FESHBACH (1953): **Methods of theoretical physics**, McGraw-Hill Book Co., New York, N.Y.
- TORRES DEL CASTILLO, G.F. (1999): **Rev. Mex. Fis.** 45, 557.
- ERINGEN, A.C. and E.S. SUHUBI (1975): **Elastodynamics, Linear Theory**, Vol. II, Academic Press, New York.
- HANISH, S.; R.V. BAIER; A.L. VAN BUREN and B.J. KING (1970): **Tables of Radial Spheroidal Waves Functions, Naval Research Laboratory, Transducer Branch, Acoustics Division**, 4, Washington D.C.
- RAND, R.H. (1968): **J. Acoust. Soc. Am.** 44, 749-751.
- AQUINO, N.; E. CASTAÑO and E. LEY-KOO (2002): **Rev. Mex. Fis.** 48, 277.

JOUANNE, M. **et al.** (2201): **Phys. Rev.** B64, 5404.

SMITH, C.F. and W.B. CRANDALL (1964): **J. Am. Ceram. Soc.** 47, 624.

RESONANCIA CICLOTRÓNICA Y DISPERSIÓN INELÁSTICA DE LUZ EN PUNTOS CUÁNTICOS SEMICONDUCTORES

Augusto González¹, Instituto de Cibernética, Matemática y Física, Cuba

Alain Delgado², Centro de Aplicaciones Tecnológicas y Desarrollo Nuclear, Cuba

RESUMEN

Resumimos un conjunto de resultados teóricos relacionados con la absorción en el infrarrojo y la dispersión inelástica (Raman) de luz en puntos cuánticos semiconductores. Cuando es posible, se presenta la comparación cualitativa con mediciones experimentales recientes.

ABSTRACT

We summarize a group of theoretical results related with the absorption in the infrared and the inelastic dispersion (Raman) of light in point's quantum semiconductors. When it is possible, the qualitative comparison is presented with recent experimental mensurations.

I. INTRODUCCIÓN

El enorme interés que se manifiesta recientemente hacia los dispositivos semiconductores de tamaño nanométrico tiene dos aristas. Por un lado, al reducir las dimensiones se puede aumentar el nivel de integración, es decir, el número de elementos, transistores, etc. por unidad de área. Y por otro lado, al reducir las dimensiones disminuyen los tiempos de respuesta, o sea que los dispositivos funcionan más rápidamente. En ambos casos, el resultado es un elemento electrónico u óptico más pequeño y potente.

La tendencia a reducir el tamaño se encuentra, sin embargo, con un límite natural, el denominado límite cuántico, que podríamos resumir en que los dispositivos no pueden ser más pequeños que átomos, las cargas no más pequeñas que la del electrón, ni la intensidad de luz absorbida o emitida menor que la de un fotón.

La nanotecnología y la nanociencia producen y estudian dispositivos compuestos de varios átomos, o de varias moléculas, o de varias capas atómicas en un sólido, o donde intervienen unos pocos electrones. Como ejemplo citemos el trabajo [1] donde, a través de mediciones de conductancia de alta precisión es posible establecer que en un punto cuántico están confinados 1, 2, 3, ..., hasta 40 electrones.

En el presente artículo nos concentramos en procesos ópticos que tienen lugar en puntos cuánticos semiconductores, en particular la absorción de luz en el infrarrojo y la dispersión

inelástica de luz (efecto Raman). Aunque no se pretende una comparación directa con el experimento, nuestros resultados están motivados por datos experimentales recientes^{2,3}, con los cuales se hace una comparación cualitativa. Los resultados son expuestos de forma resumida en las próximas secciones. Los detalles pueden hallarse en las versiones publicadas⁴⁻⁷.

II. RESONANCIA DE CICLOTRÓN EN PUNTOS CUÁNTICOS

Consideremos un sistema de electrones cuyo movimiento está confinado a un plano y sobre los cuales actúa un campo magnético perpendicular al plano de movimiento. También a lo largo de la normal, hacemos incidir luz polarizada circularmente. La absorción de luz en el infrarrojo mostrará un único pico localizado en la denominada energía de ciclotrón, $\hbar\omega_{ce} = \hbar eB/m_e$. Este resultado se conoce como Teorema de Kohn⁸ y se debe a que la luz se acopla con el centro de masa del conjunto de electrones. Para un sistema de huecos, que se comportan como partículas con carga positiva, la posición del pico de absorción se halla por la misma fórmula (basta sustituir m_e por m_h), pero la polarización de la luz es opuesta. Los electrones absorben la polarización σ^+ y los huecos la σ^- .

Este razonamiento permite comprender a grandes rasgos el experimento reportado en [2], donde en esencia se mide la absorción de ciclotrón para electrones en un pozo cuántico como función de la concentración de electrones en el mismo. A diferencia del problema mencionado en el párrafo

E-mail: ¹agonzale@icmf.inf.cu
²gran@ceaden.edu.cu

anterior, un segundo láser con energía superior a la brecha del semiconductor crea pares electrón-hueco, con lo que el sistema no contiene sólo cargas negativas, sino muchos electrones y un hueco. Por esa razón, la posición del pico de absorción deja de seguir la fórmula simple mencionada más arriba y comienza a depender de la concentración (densidad superficial) de electrones. Los resultados experimentales son "interpretados" en términos de excitaciones colectivas del tipo plasmón más un hueco. Dichos resultados pueden resumirse en que el pico de absorción se corre hacia el azul, a medida que aumenta la concentración de electrones.

En el trabajo [4] se calcula la absorción en el infrarrojo de sistemas compuestos por unos pocos electrones (de 2 a 5) y un hueco. En el plano del movimiento se ha superpuesto, además, un potencial parabólico, con el cual modelaremos un punto cuántico⁸. El trabajo extiende los cálculos presentados previamente para el biexcitón (2 electrones más 2 huecos) en un punto⁹.

La comparación directa de nuestros resultados con el experimento reportado en [2] desde luego que no es posible. El confinamiento lateral puede inducir comportamientos que no están presentes en el caso infinito. Sin embargo, uno espera que cualitativamente se reproduzca el corrimiento al azul observado en el experimento. Por otro lado, no existen impedimentos para realizar mediciones directamente en un

punto cuántico o en un arreglo de puntos. Nótese que en [2] la absorción en el infrarrojo se mide indirectamente a través de los cambios inducidos en la luminiscencia cuando el haz infrarrojo es conectado. Y la luminiscencia es una técnica extremadamente sensible y de fácil implementación.

Para los cálculos utilizamos un modelo simple de dos bandas con parámetros apropiados para el GaAs. La matriz hamiltoniana se diagonaliza exactamente en una base de funciones de partículas libres en un campo magnético. Las dimensiones de esta matriz están entre 40,000 para los sistemas más pequeños y 350,000 para los más grandes. Matrices de estas dimensiones son diagonalizadas con ayuda del algoritmo de Lanczos¹⁰, el cual nos permite obtener un conjunto de los autovalores más bajos de energía. El error estimado para las energías de excitación es de 0.02 meV y para las fortalezas de oscilador (normalizadas a la unidad) de 0.02.

Un ejemplo de los resultados se muestra en la Figura 1. En este caso, el sistema tratado es el trión o X^{-1} es decir 2 electrones y un hueco, lo que daría una carga neta igual a -1. En general, X^{n-} designará a un sistema compuesto por $n + 1$ electrones y un hueco). Los gráficos están separados de acuerdo a la proyección sobre el campo magnético del espín total de los electrones, S_e y a la polarización de la luz absorbida. Los puntos en los gráficos dan las posiciones de los picos principales de absorción.

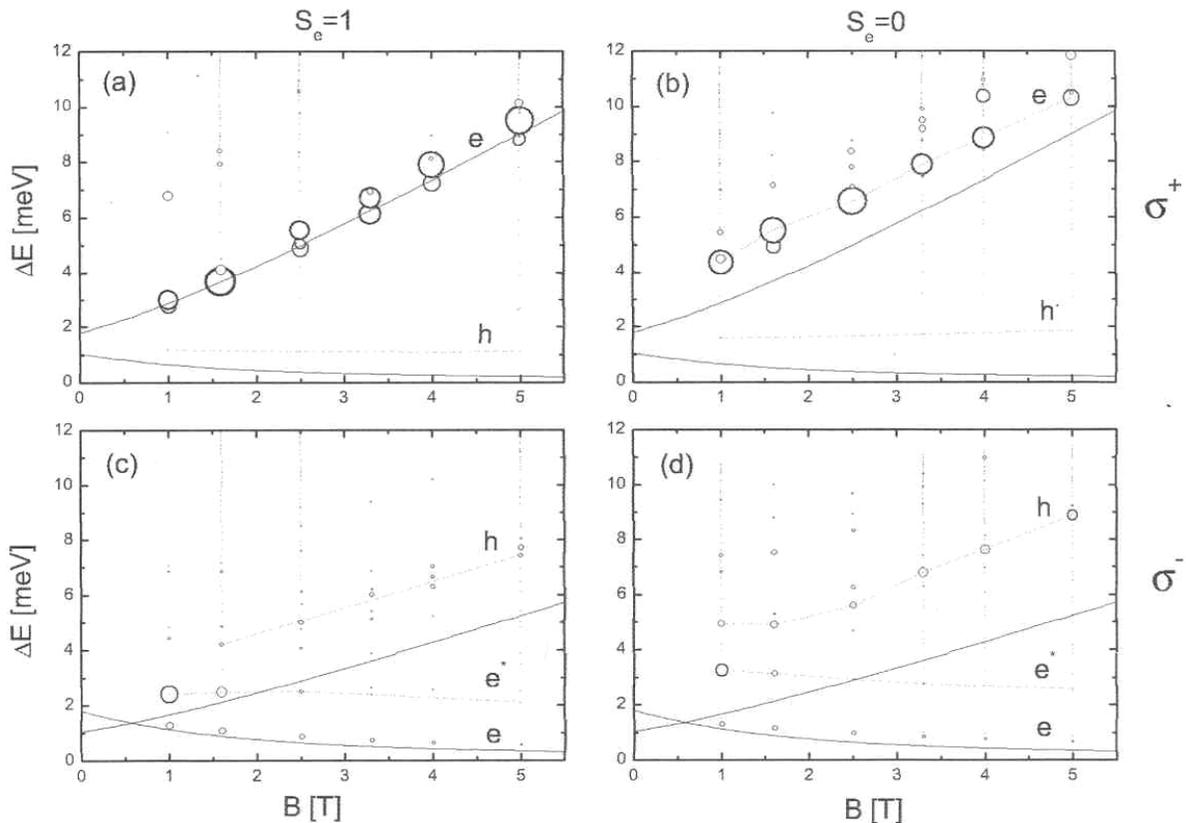


Figura 1. Posición de los picos de absorción y fortalezas de oscilador para el trión en estados tripletes ($S_e = 1$) y singletes ($S_e = 0$) de espín y polarización de la luz σ^\pm .

Como información adicional damos también la fortaleza de oscilador en forma de un círculo centrado en la posición del pico de absorción. De manera que un círculo grande simboliza un pico fuerte de absorción.

En los gráficos se ven también líneas gruesas que simbolizan la posición de los máximos de Kohn para electrones o huecos en un punto cuántico parabólico⁸:

$$\Delta E_{\pm}^{(e)} = \hbar\Omega_e \pm \frac{\hbar\omega_{ce}}{2}, \quad (1)$$

$$\Delta E_{\pm}^{(h)} = \hbar\Omega_h \mp \frac{\hbar\omega_{ch}}{2}, \quad (2)$$

donde $\Omega_e = \sqrt{\omega_{0e}^2 + \omega_{ce}^2}/4$, ω_{0e} es la frecuencia correspondiente al confinamiento lateral de los electrones, etc. El subíndice \pm en la energía se refiere a la absorción de un fotón con polarización σ^{\pm} .

El resultado principal de nuestros cálculos se puede resumir en que la interacción entre los electrones y el hueco provoca un corrimiento de los picos de absorción con respecto a la posición predicha por (1, 2). La dependencia de este corrimiento respecto a la carga neta, n , del punto cuántico es la siguiente: cuando n va de 1 a 3 el corrimiento disminuye, es decir, los picos se acercan a las posiciones dadas por (1, 2), mientras que para $n = 4$ crece nuevamente, manifestando la tendencia observada en el experimento de que cuando la concentración de electrones aumenta, los picos de absorción se corren hacia el azul.

III. DISPERSIÓN RAMAN EN PUNTOS CUÁNTICOS

Consideremos, otra vez, el modelo simplificado de punto cuántico parabólico descrito en la sección anterior, pero incluyamos en él decenas de electrones. La intención es acercarnos a las condiciones de los experimentos [3], en los cuales se miden las intensidades Raman en punto con decenas o cientos de electrones. La dispersión de la luz en este modelo se puede calcular a partir de la teoría de perturbaciones de segundo orden¹¹. Es decir, el tránsito desde un estado inicial electrónico, $|i\rangle$, hasta un estado final, $|f\rangle$, con la consiguiente absorción de un fotón de frecuencia ν_i y emisión de otro de frecuencia ν_f , se realiza a través del paso (virtual) por estados intermedios, $|int\rangle$. En las condiciones de los experimentos, la energía del fotón incidente es $\hbar\nu_i > E_{gap}$, donde E_{gap} es la brecha del semiconductor, por lo que los estados intermedios contienen, además de los electrones iniciales, un par adicional electrón-hueco.

La amplitud del proceso se calcula a partir de la expresión:

$$A_{fi} \sim \sum_{int} \frac{\langle f, N_i - 1, l_f | H_{e-r}^+ | int, N_i - 1 \rangle \langle int, N_i - 1, | H_{e-r}^- | i, N_i \rangle}{\hbar\nu_i - (E_{int} - E_i) + i\Gamma_{int}}, \quad (3)$$

donde H_{e-r} es el hamiltoniano de interacción de los electrones con la radiación y Γ_{int} es el ancho energético (fenomenológico) de los niveles intermedios. N_i es el número de fotones en el haz incidente.

El cálculo de A_{fi} requiere de: a) Las energía y funciones de onda uniparticulares de electrones y huecos, que son obtenidas en la aproximación de Hartree-Fock. Las mismas son utilizadas como punto de partida en los pasos posteriores. b) Los estados finales de N_e electrones, $|f\rangle$, hallados por medio de la aproximación de fase aleatoria (RPA por sus siglas en inglés)¹². c) Los estados intermedios de $N_e + 1$ electrones y un hueco, $|int\rangle$, que se obtienen a partir del denominado formalismo pp-RPA. Y, finalmente, d) calcular los elementos de matriz de H_{e-r} con estas funciones y realizar la suma (3).

Con las amplitudes A_{fi} uno calcula la sección eficaz de dispersión:

$$\frac{d\sigma}{d\nu_f} \sim \sum_f |A_{fi}|^2 \delta(E_i + \hbar\nu_i - E_f - \hbar\nu_f), \quad (4)$$

que es la magnitud medida experimentalmente.

Como se mencionó antes, en el conjunto de experimentos discutidos en [3] se obtienen los espectros Raman en puntos con decenas o cientos de electrones. Mediciones sin o en presencia de campos magnéticos, sin o teniendo en cuenta la polarización de la luz incidente y reflejada, bajo diferentes condiciones de resonancia, son reportadas en estos experimentos. De forma simplificada, podemos resumir los resultados así: bajo condiciones de resonancia extrema (es decir cuando $\hbar\nu_i$ prácticamente coincide con E_{gap}) el espectro Raman es dominado por excitaciones uniparticulares, mientras que a 40 meV o más por encima de E_{gap} los picos Raman están asociados a estados finales que representan excitaciones colectivas (de espín o de carga). En los experimentos, $\hbar\nu_i$ no va mucho más allá de 40 meV por encima de E_{gap} con el objetivo de no inducir procesos con fonones ópticos. El efecto principal del campo magnético es mezclar las excitaciones de espín y de carga, así como desplazar la posición de los picos Raman.

En el artículo [7] se presenta un análisis detallado de la dispersión Raman a cero campo magnético. Se consideran tres condiciones de resonancia:

- a) $E_{\text{gap}} - 30 \text{ meV} < h\nu_i < E_{\text{gap}}$,
- b) $E_{\text{gap}} < h\nu_i < E_{\text{gap}} + 30 \text{ meV}$ (resonancia extrema) y
- c) $E_{\text{gap}} + 30 \text{ meV} < h\nu_i$. El caso a) no ha sido abordado experimentalmente pero en el artículo se muestra su utilidad para identificar los diferentes picos en el espectro. La teoría presentada en [7] reproduce de forma cualitativa los aspectos más relevantes observados en el experimento y señala otros, como por ejemplo el papel de Γ_{int} y su dependencia con la energía de excitación, que no habían sido notados previamente.

Como ejemplo y resumen de los resultados de [7], en la Figura 2 mostramos la intensidad del pico más importante del espectro (excitación monopolar colectiva de carga) como función de la energía de excitación, $h\nu_i$. La brecha efectiva en este caso es aproximadamente 1 600 meV. En el caso $h\nu_i < E_{\text{gap}}$ observamos una dependencia monótona de la intensidad del pico Raman. En resonancia extrema, por el contrario, las oscilaciones abruptas de la intensidad están asociadas a estados intermedios

resonantes con $h\nu_i$. Cuando $h\nu_i > E_{\text{gap}} + 30 \text{ meV}$, el aumento de Γ_{int} hace que se pierda la dependencia oscilante con Γ_{int} observada antes y, en general, provoca una disminución de la intensidad. Sólo para determinados estados intermedios del tipo "excitón + excitación colectiva", Γ_{int} observa valores relativamente pequeños. En la figura, uno de estos estados es el responsable del aumento de intensidad en $h\nu_i \approx 1\,642 \text{ meV}$. En la figura se han incluido, además, en forma de líneas verticales los numeradores que entran en la suma (3). La comparación con las intensidades Raman muestra que los efectos de interferencia son poco importantes en estos procesos.

Otros resultados con y sin campo magnético externo incluido son presentados en [6]. El caso de puntos cuánticos neutros o no dopados, donde una población de electrones y huecos con $N_e = N_h$ es inducida por un segundo láser, es tratado en [5]. Este último caso, hasta el momento, no cuenta con una comprobación experimental.

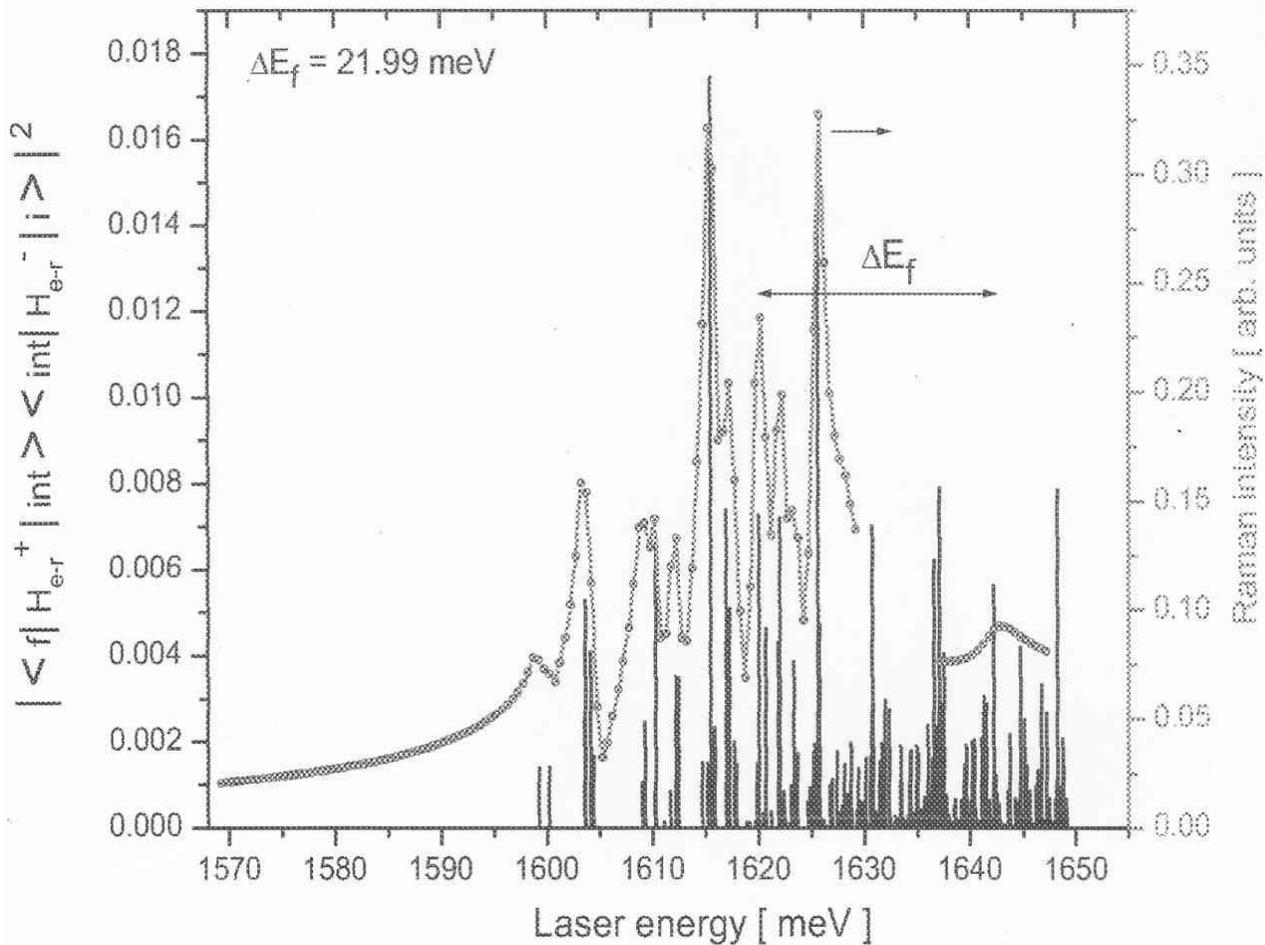


Figura 2. Intensidad del pico Raman asociado a un estado final monopolar de carga como función $h\nu_i$. Una resonancia en el canal de salida a 1 642 meV es modelada.

IV. CONCLUSIONES Y PERSPECTIVAS

Hemos presentado a grandes rasgos los resultados de los artículos [4-7] sobre absorción en el infrarrojo y dispersión Raman en puntos cuánticos, así como los experimentos [2,3] que motivaron estos cálculos.

La perspectiva más interesante que se abre ante nuestros ojos se relaciona con el efecto Raman. Cálculos detallados en presencia de campo magnético son interesantes de por sí y necesarios en caso de una comparación con resultados experimentales. Por otro lado, el ancho de los niveles intermedios Γ_{int} (o por lo menos la contribución fonónica al mismo) puede ser calculado e introducido en la expresión (3). Tal y como se mostró en [7] con un ansatz fenomenológico para Γ_{int} , incluir la dependencia de Γ_{int} con la energía de excitación es imprescindible para una descripción correcta de la dispersión Raman cuando $h\nu_i > E_{gap} + 30$ meV. Otra posibilidad

interesante es la descripción de las resonancias en los canales de salida, que en [13] se interpretaron como "excitón + excitación colectiva". La modificación requerida en nuestro formalismo consiste en añadir a los estados intermedios (que en esencia se construyen como un par electrón-hueco por encima del estado de Hartree-Fock de N_e electrones) otras componentes que correspondan a un par electrón-hueco más una excitación del estado de Hartree-Fock. Estas perspectivas teóricas y el interés mostrado por experimentalistas en retomar las mediciones Raman sobre bases superiores garantizan que el efecto Raman continuará siendo un tema de trabajo excitante en los próximos años.

AGRADECIMIENTOS

Este artículo de revisión está basado en trabajos conjuntos con R. Pérez, J. Mahecha, E. Menéndez-Proupin y D. J. Lockwood.

REFERENCIAS

1. TARUCHA, S.; D.G. AUSTING and T. HONDA (1996): **Phys. Rev. Lett.** 77, 3613.
2. NICKEL H.A. et al. (2002): **Phys. Rev. Lett.** 88, 056801.
3. SOTOMAYOR-TORRES, C.M.; D.J. LOCKWOOD and P.D. WANG (200): **J. Electr. Materials** 29, 576.
4. PÉREZ, R.; A. GONZÁLEZ and J. MAHECHA (2003): **J. Phys.: Condens. Matter** 15, 7681.
5. DELGADO, A.; A. GONZÁLEZ and E. MENÉNDEZ-PROUPIN (2002): **Phys. Rev.** B 65, 155306.
6. DELGADO, A. and A. GONZÁLEZ (2003): **J. Phys.: Condens. Matter** 15, 4259 (2003).
7. DELGADO, A.; A. GONZÁLEZ and D.J. LOCKWOOD: **Phys. Rev. B.** (por aparecer) <http://arxiv.org/cond-mat/0312636>,
8. JACAK, L.; P. HAWRYLAK and A. WOJS (1998): **Quantum dots** (Springer- Verlag, Berlin).
9. PÉREZ, R. and A. GONZALEZ (2001): **J. Phys.: Condens. Matter**, 13, L539.
10. GONZÁLEZ, A. (2002): "Una descripción breve del algoritmo de Lanczos", **Revista Cubana de Física** 19(5).
11. LOUDON, R. (1964): **Adv. Phys.** 13, 423.
12. RING, P. and P. SCHUCK (1980): **The Nuclear Many-Body Problem** (Springer- Verlag, New-York).
13. DANAN, G. et al. (1989): **Phys. Rev. B** 39, 5512.

¿CUMPLE LA TEORÍA DE DE BROGLIE-BOHM CON EL PRINCIPIO DE CORRESPONDENCIA?

Brenda Carballo Pérez¹ y Jesús Rubayo Soneira²

Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas, Ciudad de La Habana, Cuba

RESUMEN

La teoría de De Broglie-Bohm es una de las teorías de variables ocultas más discutidas en las últimas décadas. Nosotros centramos nuestra atención en la verificación del principio de correspondencia en esta teoría. Probamos que tan importante principio de la física no se cumple trayectoria a trayectoria en su forma fuerte (para todos los tiempos en todos los sistemas macroscópicos), con independencia de la elección de las condiciones iniciales. Además comparamos el promedio de las trayectorias cuánticas con el promedio de las trayectorias clásicas y analizamos los resultados. Simultáneamente, encontramos que un sistema que no tiene caos clásico (dos osciladores armónicos acoplados), tampoco presenta caos, según el análisis de las trayectorias de Bohm.

ABSTRACT

De Broglie-Bohm theory is one of the most discussed theories of hidden variables in the last decades. We mainly focus our attention on the validity of the correspondence principle in this theory. We prove that such an important principle in Physics is not fulfilled trajectory by trajectory in its strong form (for all times in all macroscopic systems), independently of how the initial conditions are chosen. We also compare the average quantum trajectories with the average classical ones and we analyze the results. At the same time, we find out that a system not having classical chaos (two coupled harmonic oscillators) doesn't present chaos, according to the analysis of the Bohm trajectories.

INTRODUCCIÓN

La mecánica cuántica como teoría no determinista en el sentido clásico, ha sido objeto de críticas. Los trabajos de De Broglie en 1926 y luego los de Bohm, a comienzos de la década del 50 del pasado siglo [1, 2, 3], dieron origen a la teoría de variables ocultas que hoy conocemos como la teoría de De Broglie-Bohm. Actualmente grupos de destacados científicos se encuentran aplicándola a sistemas metodológicos y moleculares simples [4, 5]; mientras que otros, la critican o perfeccionan. [6, 7, 8, 9]. Algunos plantean que el caos cuántico debe emerger, naturalmente, en la mecánica de Bohm [8].

En este trabajo nos concentramos, fundamentalmente, en comprobar la validez del principio de correspondencia en esta teoría.

La teoría de De Broglie-Bohm

El propósito de la teoría de De Broglie-Bohm es ofrecer una interpretación alternativa consistente de la mecánica cuántica.

Según Bohm [1, 2, 3] esta interpretación permite concebir cada sistema individual en un estado definido, que evoluciona con el tiempo según leyes precisas (análogas a las ecuaciones clásicas del movimiento). Las probabilidades cuánticas son

consideradas como una necesidad práctica y no como consecuencia de no poder conocer las coordenadas y momentos de las partículas con precisión infinita en cada instante de tiempo. El principio de incertidumbre no aparece aquí como una limitación inherente a la precisión con la cual podemos concebir correctamente la definición simultánea de momento y posición; sino más bien, como una limitación práctica a la precisión con la cual estas variables pueden ser simultáneamente medidas, debido a las perturbaciones incontrolables que introduce el aparato de medición. Las posiciones y momentos de las partículas son, por lo tanto, las variables ocultas de esta teoría.

Pretende además, realizar modificaciones en la formulación matemática, cuyos efectos sean insignificantes en el dominio atómico, (donde la presente teoría cuántica concuerda con el experimento); pero de crucial importancia en el dominio de las dimensiones del orden de 10^{-13} cm (donde la actual teoría cuántica resulta inadecuada).

Bohm basó su teoría en los postulados que enunció de la siguiente manera:

- a) Un sistema mecánico cuántico, por ejemplo un electrón, consiste básicamente en una partícula con su posición bien definida, la cual varía continuamente como una función del tiempo.

E-mail: ¹bcarballo@fctn.isctn.edu.cu

²jrs@fctn.isctn.edu.cu

b) Esta partícula siente la influencia no solo del potencial clásico, sino también de un potencial cuántico adicional, el cual es importante al nivel atómico y despreciable a nivel macroscópico.

c) Si escribimos $\psi = \text{Re} \frac{iS}{\hbar}$, donde ψ es la función de onda y R y S son reales, entonces el potencial cuántico está dado por:

$$Q(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 R(x,t)}{R(x,t)} \quad (1)$$

La ecuación del movimiento de la partícula toma la forma:

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -\nabla\{Q(x,t) + V(x,t)\} \quad (2)$$

Para que su teoría coincida en el dominio atómico con la mecánica cuántica tradicional, Bohm adicionó los postulados siguientes:

- 1) El campo ψ satisface la ecuación de Schrödinger.
- 2) La velocidad de la partícula se restringe a:

$$v = \frac{\nabla S(x,t)}{m} \quad (3)$$

- 3) No podemos predecir o controlar la localización precisa de la partícula, pero tenemos un ensemble estadístico de ellas con la densidad de probabilidad $|\psi(x)|^2$.

Cálculo de trayectorias clásicas y cuánticas

Calculamos las trayectorias clásicas y cuánticas al sistema formado por dos osciladores armónicos acoplados, procediendo del siguiente modo: para las clásicas, resolvimos las ecuaciones de Hamilton y para las cuánticas, se hallaron las coordenadas y momentos de la siguiente manera:

$$p_x(x_p, x_g, t) = -\frac{i\hbar}{2} \frac{1}{\psi^* \psi} \left\{ \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right\} \quad (4)$$

$$\frac{\partial x}{\partial t} = \frac{p_x(x_p, x_g, t)}{m_x} \quad (5)$$

(x puede ser x_p o x_g : las coordenadas correspondientes a los dos osciladores, ψ satisface la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo.)

Para ambos tipos de trayectorias, las condiciones iniciales para las coordenadas se generaron con la densidad de probabilidad dada por la función que se escogió como condición inicial para el problema cuántico: el producto de una gaussiana centrada en - 0.75 a.u. y la autofunción correspondiente al estado básico de uno de los osciladores. Los momentos iniciales en el caso clásico se eligieron iguales a cero por semejanza con las trayectorias cuánticas.

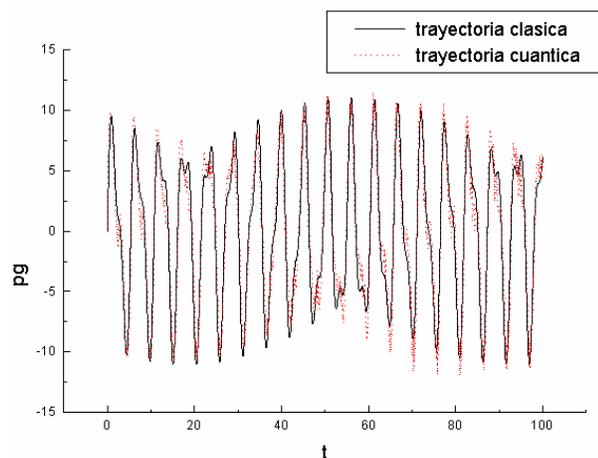
Sobre el principio de correspondencia en la teoría de De Broglie-Bohm

Según el postulado b de Bohm, el potencial cuántico debe hacerse despreciable a nivel macroscópico. Sin embargo, para el estado básico del oscilador armónico, cuando hacemos tender la constante de Planck a cero, esto no ocurre:

$$Q_{\hbar \rightarrow 0}(x) = -\frac{kx^2}{2} \quad (6)$$

Teniendo en cuenta el ejemplo analizado, de cumplirse el principio de correspondencia, no sería de manera fuerte [6] (para todos los sistemas físicos en todos los instantes de tiempo) o los criterios más conocidos para caracterizar el límite clásico (números cuánticos grandes, longitud de onda de De Broglie pequeña, masas grandes, etc), no nos serían de utilidad para verificarlo.

Al comparar cada trayectoria clásica con su análoga cuántica, estas no tienen por qué ser iguales entre sí (Figura 1), debido a la presencia del potencial cuántico. Como el mismo no siempre se hace despreciable a nivel macroscópico; incluso en el límite clásico, las trayectorias no tienen por qué coincidir, eligiendo las condiciones iniciales tal y como lo



hicimos.

Figura 1. Representación de una trayectoria clásica y su análoga cuántica.

Sin embargo, las trayectorias promedio clásica, promedio cuántica y la generada con los valores medios de las condiciones iniciales para x_p y x_g , sí son iguales (se promediaron 100 trayectorias de cada tipo) [Figura2]. Esto se debe a que la fuerza cuántica promedio es cero y la mayor potencia que aparece en el potencial es la cuadrática. Pero debido a que el potencial cuántico promedio es mayor o igual que cero [10], a estas trayectorias promedios les corresponden, respectivamente energías diferentes:

- Energía media clásica: $E_m = 6.24735931$ a.u.
- Energía cuántica (valor medio del Hamiltoniano): $E_c = 9.01908491$ a.u.
- Energía clásica evaluada en los valores medios iniciales de x_p y x_g : $E(x_{pm}, x_{gm}) = 5.625$ a.u.

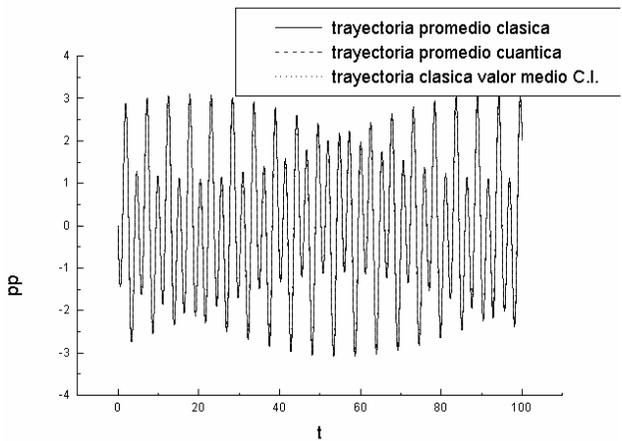


Figura 2. Trayectorias: promedio clásica, promedio cuántica y la clásica generada con los valores medios de las condiciones iniciales para x_p y x_g .

Es conocido de la mecánica cuántica tradicional que para estados excitados las probabilidades cuánticas tienden a las clásicas. Alejar del centro de la gaussiana, puede ser interpretado como una manera de que esto ocurra, debido a que de esta forma contribuyen más a la función de onda inicial los estados excitados.

En la siguiente tabla se muestran los valores de las energías definidas anteriormente, para diferentes posiciones del centro de la gaussiana:

Energías	$X_0 = -0.75$ a.u.	$X_0 = -0.875$ a.u.	$X_0 = -1.0$ a.u.
E_m (a.u.)	6.24735931	8.28313521	10.6298656
$E(x_{pm}, x_{gm})$ (a.u.)	5.63252463	7.66767789	10.0148473
E_c (a.u.)	9.01908491	11.0486466	13.3891604
$E_c - E_m$ (a.u.)	2.7717256	2.76551139	2.7592948

Podemos apreciar que el valor de $E_c - E_m$ permanece aproximadamente constante, correspondiendo al valor de $\langle Q \rangle$ en el instante inicial. Entonces,

si tenemos claro a qué se debe la diferencia entre las energías, podríamos pensar que comparar las trayectorias promedio, resulta más adecuado que la comparación trayectoria a trayectoria. Sin embargo, las trayectorias promedios son iguales, estemos en el límite macroscópico o no.

P. R. Holland [4] considera que si la posición inicial de Bohm está en el centro de un paquete gaussiano, la fuerza inicial cuántica es idénticamente cero y permanece cero para todo tiempo posterior. Sin embargo, en un artículo reciente [6], bajo estas mismas condiciones, se viola el principio de correspondencia.

Otro aspecto importante a señalar es el hecho de que los estados estacionarios de Bohm no tienen análogo clásico, lo que trata de salvar Holland [4] diciendo que las trayectorias de Bohm son las reales y no las que se obtienen al realizar la medición, y que, si se llevara a cabo esta, se obtendría el mismo resultado que en la mecánica cuántica tradicional, la cual está comprobado que cumple con el principio de correspondencia. El problema aquí radica en que para introducir el observador en su demostración, cambia de sistema físico, incluso a nivel macroscópico. Otras alternativas sugeridas para solucionar este problema son: no utilizar estados estacionarios como condiciones iniciales para la función de onda, sino más bien superposiciones de estos; o, de otra forma, desarrollar la formulación matemática de la teoría sobre la representación de los estados coherentes [8].

Estudio del caos a través de variables ocultas

Al calcular las funciones de correlación (autocorrelación) a 20 trayectorias cuánticas para los dos osciladores acoplados, para cada una de las variables (x_p, x_g, p_p, p_g), encontramos que estas oscilan en el tiempo, lo cual es asociado con orden en el sistema [Figura 3] [10].

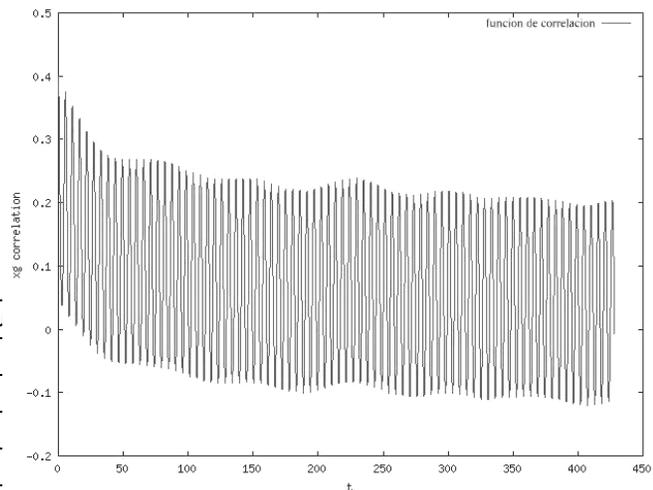


Figura 3. Función de correlación (autocorrelación) para la variable x_g de una trayectoria cuántica.

CONCLUSIONES

El postulado b de Bohm no se verifica rigurosamente de manera general, debido a que el potencial cuántico no se vuelve despreciable a nivel macroscópico para todos los sistemas físicos, en cualquier representación.

Todo parece indicar que el cumplimiento del principio de correspondencia, en su forma fuerte [6], en la teoría de De Broglie-Bohm, depende fundamen-

talmente de la buena elección de las condiciones iniciales (incluso de la representación utilizada [8]), lo cual no está contemplado en los postulados de la misma.

El estudio del caos a través de variables ocultas llevado a cabo hasta el momento, muestra que un sistema que no presenta caos clásico, tampoco presenta caos debido al análisis de las trayectorias de Bohm.

REFERENCIAS

- [1] BOHM, DAVID (1952): **Phys. Rev.**, 85(2), 166.
- [2] _____ (1952): **Phys. Rev.**, 85(2), 180.
- [3] _____ (1953): **Phys. Rev.**, 89(2), 458.
- [4] HOLLAND, PETER R. (1993): **The quantum theory of motion: an account of the De Broglie-Bohm causal interpretation of quantum mechanics**, Cambridge University Press, New York.
- [5] SANZ ORTIZ, ÁNGEL S. (1999): Tesina de licenciatura: Descripción mediante trayectorias de Bohm de la difracción atómica por superficies, Madrid.
- [6] LEONG LAN, BOON (2000): **Phys. Rev. A**, 61, 032105-1.
- [7] BRIDA, G. **et al.** (2002): arXiv:quant-ph/0206196 v1.
- [8] GARCÍA DE POLAVIEJA, GONZALO (1996): **Mark S. Child, Phys. Rev. E** 55(2),1451.
- [9] _____ (1996): **Phys. Rev. A**, 53(4), 2059.
- [10] CABALLO PÉREZ, BRENDA (2003): Tesis de licenciatura: Sobre una posible descripción del caos cuántico en términos de variables ocultas, C. Habana.

SIMPLIFICATION OF POCKLINGTON'S EQUATION KERNEL FOR ARBITRARY SHAPED THIN WIRES

Víctor Barrera Figueroa¹, Jorge Sosa Pedroza², José Luis López Bonilla³
Instituto Politécnico Nacional, Escuela Superior de Ingeniería Mecánica y Eléctrica
Sección de Estudios de Postgrado e Investigación, UPALM, Lindavista, México D.F.

ABSTRACT

The simplification of Pocklington's equation kernel and the software implementation of the arbitrary shaped thin wire problem is presented here in order to get a useful antenna engineering tool that could be used in determining the current distribution in arbitrary shaped thin wires. The software is based in the widely used method of moments and is implemented in programming language C++. The work presented in this paper is concerned about how to simplify the kernel of the Pocklington's integro-differential equation in order to be more efficient computationally. We obtained an integral equation that reduces not only the programming efforts, but also the time spent in calculations. The integral equation presented in this paper was thought not only for arbitrary shaped thin wires, but also for the case of straight thin wires.

Key words: method of moment, Pocklington's equation, point matching technique, current distribution.

RESUMEN

La simplificación del grano de la ecuación de Pocklington y la aplicación del software del problema del alambre delgado formado arbitrario se presenta aquí para conseguir una antena útil que diseñe una herramienta que podría usarse determinando la distribución actual en alambres delgados formados arbitrarios. El software está basado en el método ampliamente usado de momentos y se lleva a cabo programando idioma C++. El trabajo presentado está interesado sobre cómo simplificar el grano de la ecuación del integro-diferencial de Pocklington para ser computacionado con más eficiencia. Nosotros obtuvimos una ecuación íntegra que no sólo reduce los esfuerzos de la programación, sino también el tiempo de gasto en cálculos. La ecuación íntegra presentada en este trabajo no sólo se pensó para los alambres delgados formados arbitrarios, sino también para el caso de recta de los alambres delgados.

Palabras clave: método de momento, la ecuación de Pocklington, punto que empareja técnica, distribución actual.

1. INTRODUCTION

Knowing the current distribution in any conductor is having the total knowledge about its electromagnetic behavior. For the electrical engineer this is the key for determining the electromagnetic field at any point of the surrounded space (through the magnetic and electric potential), and hence all the electric characteristics would be determined, i.e. input impedance, radiation pattern, directional gain, etc. [1].

The theoretical analysis is based upon two philosophies. The first one, the classical analysis, makes a great effort in guessing how the current is distributed along the antenna. For simple structures this method brings accurate results, but in complex structures (such as helical antennas or cross antennas) we don't have a priory knowledge about the current distribution itself, so the obtained results could be wrong. However, in order to improve the

results, the second philosophy brings a better solution. This is based upon the well known method of moments (MM), which was introduced by Galerkin and was popularized by Roger F. Harrington in 1967 [2]. This method, when applied in an electromagnetic problem, brings results whose accuracy is as good as the engineer needs or the computer could provide [3].

The MM solution uses the Pocklington's equation, which is derived from the electric field integral equation. The solution can be found in the applied literature for straight thin wires [4,5]. For arbitrary shaped wires is necessary other integral equation formulation, starting with Mei's analysis and successors [6,7]. Although we are working in the procedure for helical and cross antennas, we present in this paper the well known solution for straight and loop antennas in order to compare results with the analytical solution of the same problem.

E-mail: ¹victorbarreraf@hotmail.com,
²jsosa@ipn.mx,
³jlopezb@ipn.mx

In this paper we show the simplification we made to the Pocklington's equation. Such simplification transforms the integro-differential equation in an integral one which can be easily evaluated through some numerical integration algorithm. This simplification saves time used by the computer for calculating the impedance and current matrices which is an important issue for being considered when we are looking for a better solution for the considered problem.

2. THE ELECTRIC FIELD INTEGRAL EQUATION

The electric field integral equation describes the strong relationship between the electric field and the current distribution on the conductor. This equation can be derived from Maxwell's equations [8] through the use of the concept of magnetic potential vector and electric potential scalar. Mathematically:

$$E^t(r) = -\frac{j\eta}{k} \int_v J(r') [k^2 + \nabla^2] \frac{e^{-jk|r-r'|}}{4\pi|r-r'|} dv' \quad (1)$$

Where $E^t(r)$ is the total electric field vector measured at the observation point r ; $J(r')$ is the current distribution (the unknown of the problem) located at the source point r' ; $[k^2 + \nabla^2]$ is the Helmholtz's operator [9] dealing on Green's function for the free space $e^{-jk|r-r'|}/4\pi|r-r'|$; k and η is the wave number and the intrinsic impedance for the free space, respectively:

$$k = \omega\sqrt{\mu_0\epsilon_0} \quad \eta = \sqrt{\mu_0/\epsilon_0} \quad (2)$$

Where ω is the angular frequency of the current and μ_0 and ϵ_0 is the permeability and permittivity of the free space, respectively. Notice the use of the volume integral over all source points in the structure that contribute to the total electric field. As we can see in equation (1), the unknown is inside the integral operator.

3. POCKLINGTON'S INTEGRAL EQUATION FOR THIN WIRES

Pocklington's integral equation can be derived from (1) by applying the electric field boundary condition over the structure of the arbitrary shaped thin wire. This condition states that the total electric field vanishes over the surface of any perfectly conducting metal. In practice, the metal from which the antennas are made is almost as perfect as an ideal conductor (i.e. copper) and hence this condition models accurately the current behavior on the wire's surface. If the wire's surface is represented by $r = r_s$, then:

$$E^t(r_s) = E^i(r_s) + E^s(r_s) = 0 \quad (3)$$

Where $E^i(r_s)$ is the impressed electric field and $E^s(r_s)$ is the scattered electric field. For high frequencies, due the skin effect, the current will be located all over the wire's surface. The more the frequency increases, the better the current will be confined in an infinitesimal layer that cover the wire. The skin depth δ is obtained from:

$$\delta = \sqrt{2/\omega\mu\sigma} \quad (4)$$

Where σ is the electrical conductivity of the metal from which the antenna was made. By using (1), (3) and considering that the current is located only on the wire's surface we can get the impressed electric field on the wire's surface, as is shown in Figure 1:

$$E^s(r = r_s) = -\frac{j\eta}{k} \int_s \int_\phi J_s(r' = r_s) [k^2 + \nabla^2] \frac{e^{-jk|r-r'|}}{4\pi|r-r'|} ad\phi' ds' \quad (5)$$

Notice that the integration is over the wire's surface. The variable s' represents the arch length over the wire and ϕ' the azimuthal angle around the cross section of the wire. We have supposed that the wire is much thinner than the wavelength of the current. Under this assumption it is valid to suppose that the current distributes itself without circumferential variations; this is called the thin-wire approximation.

If the wire's radius is represented by a , then the superficial current distribution can be expressed as:

$$2\pi a J_s = I_s(s') \Rightarrow J_s = \frac{I_s(s')}{2\pi a} \quad (7)$$

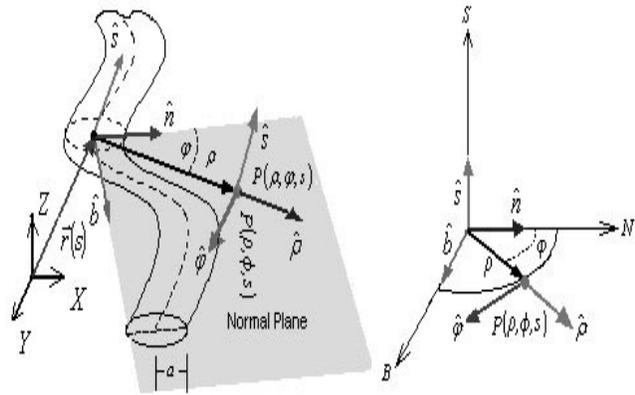


Figure 1. Relations among the vectors of the arbitrary shape wire.

Due the azimuthal independence, the current distribution only depends of the arch length; in other words, we can think that the current is confined in a very thin current filament $I_s(s')$ over the wire's surface. If the axis of the wire is represented by the following vectorial equation:

$$\mathbf{r}(s) = x(s)\mathbf{i} + y(s)\mathbf{j} + z(s)\mathbf{k} \quad (8)$$

Then the curve which represents the current filament has the next vectorial equation:

$$\mathbf{r}'(s') = \mathbf{r}(s') + a\mathbf{n}(s') \quad (9)$$

Where $\mathbf{n}(s)$ is the unit normal vector for the wire's axis; in other words, the curve which represents the current filament is a parallel curve to the curve which represents the wire's axis. Considering the circular cross section, the wire's axis will have an infinite collection of parallel curves, although in practice, we select the one which could make the estimations easier.

Applying the former considerations we can get an expression for the impressed electric field over the wire's surface, known as the Pocklington's equation:

$$\mathbf{E}'_s = -\frac{j}{\omega\epsilon} \int_{s'} I_s(s') \left[k^2 \mathbf{s} \cdot \mathbf{s}' + \frac{\partial^2}{\partial s \partial s'} \right] \frac{e^{-jk|r-r'|}}{4\pi|r-r'|} ds' \quad (10)$$

Where \mathbf{E}'_s is the tangential impressed electric field. Notice that due the thin-wire approximation and the skin effect, we could express the electric field as a linear integration over the arch length s' .

The equation (10) is the general Pocklington's equation which is valid for any possible geometry that the wire could have; nevertheless, Pocklington's equation form found in the applied literature is restricted only for straight wires [Balanis, op. cit].

The wire's geometry is expressed by the dot product $\mathbf{s} \cdot \mathbf{s}'$, where $\mathbf{s}(s)$ is the unit tangential vector for the wire's axis and $\mathbf{s}'(s')$ is the unit tangential vector for the parallel curve which represents the current filament, as is shown in Figure 2. These vectors are calculated from:

$$\mathbf{s}(s) = \frac{dx(s)}{ds} \mathbf{i} + \frac{dy(s)}{ds} \mathbf{j} + \frac{dz(s)}{ds} \mathbf{k} \quad (11)$$

$$\mathbf{s}'(s') = \frac{dx'(s')}{ds'} \mathbf{i} + \frac{dy'(s')}{ds'} \mathbf{j} + \frac{dz'(s')}{ds'} \mathbf{k}$$

The geometry is also expressed by the difference between the vectors $|r-r'|$ which can be expressed as:

$$R = |R| = |r-r'| = \sqrt{[x(s) - x'(s')]^2 + [y(s) - y'(s')]^2 + [z(s) - z'(s')]^2} \quad (12)$$

In this way, the work just consists in finding the vectors which represent the parallel curve and the axis curve for the considered wire.

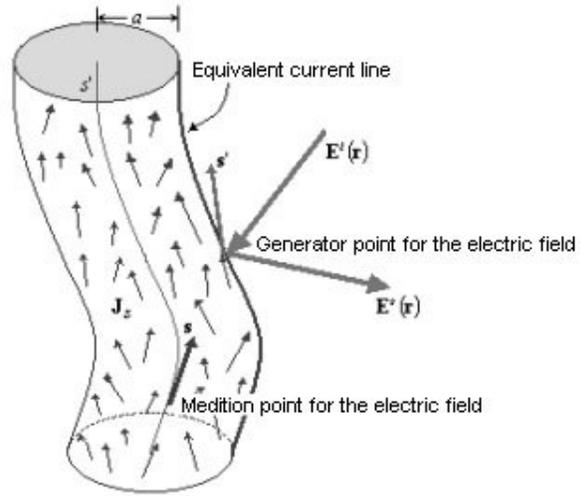


Figure 2. Unit tangential vectors for the thin wire.

4. THE MM SOLUTION TO POCKLINGTON'S EQUATION

The MM is a numerical technique which transforms an operational equation into a matrix equation. The fact that an operational equation could be discretized is the base in which the equation could be solved through a computational procedure [10].

The objective of the MM applied in Pocklington's equation is to get the current distribution $I_s(s')$ of the wire. Looking at (10) is clear that reaching that goal is a very difficult task because the unknown function $I_s(s')$ is inside the integral operator. The formulation of the MM is needed in order to get a numerical solution of (10) instead of an analytical one (in cases where the wire's geometry is simpler, it is possible to get an analytical solution for (10), but in other cases there isn't warranty for getting such one).

The MM states that the unknown function must be expressed in terms of a linear combination of linearly independent functions $i_n(s')$ called basis functions:

$$I_s(s') = \sum_{n=1}^N c_n i_n(s') \quad (13)$$

Where c_n are unknown coefficients that must be determined and N is the number of basis functions. By substituting (13) into (10) it results in one equation with N unknowns:

$$\mathbf{E}'_s = -\frac{j}{\omega\epsilon} \sum_{n=1}^N c_n \int_{s'} i_n(s') \left[k^2 \mathbf{s} \cdot \mathbf{s}' + \frac{\partial^2}{\partial s \partial s'} \right] \frac{e^{-jk|r-r'|}}{4\pi|r-r'|} ds' \quad (14)$$

In order to get a consistent equation system we must find N linearly independent equations, which can be obtained by taking the inner product of (14)

with another set of N linearly independent functions $w_m(s)$ chosen, called weighting function:

$$\langle w_m, E_s^l \rangle = -\frac{j}{\omega \epsilon} \sum_{n=1}^N c_n \left\langle w_m, \int_{s'} i_n(s') \left[k^2 s \bullet s' + \frac{\partial^2}{\partial s \partial s'} \right] \frac{e^{-jk|r-r'|}}{4\pi|r-r'|} ds' \right\rangle$$

$$m = 1, 2, \Lambda, N \quad (15)$$

Remembering the definition of inner product we can write the system (15) in the form:

$$\int_s w_m E_s^l ds = -\frac{j}{\omega \epsilon} \sum_{n=1}^N c_n \int_s w_m \int_{s'} i_n(s') \left[k^2 s \bullet s' + \frac{\partial^2}{\partial s \partial s'} \right] \frac{e^{-jk|r-r'|}}{4\pi|r-r'|} ds' ds$$

$$m = 1, 2, \Lambda, N \quad (16)$$

The system could be written in a matrix form:

$$\begin{bmatrix} Z_{11} & Z_{12} & \Lambda & Z_{1N} \\ Z_{21} & Z_{22} & \Lambda & Z_{2N} \\ M & M & O & M \\ Z_{N1} & Z_{N2} & \Lambda & Z_{NN} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ M \\ c_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ M \\ v_N \end{pmatrix} \quad (17)$$

$$[Z_{mn}](c_n) = (v_m)$$

Where the elements Z_{mn} are calculated from:

$$Z_{mn} = -\frac{j}{\omega \epsilon} \int_s w_m \int_{s'} i_n(s') \left[k^2 s \bullet s' + \frac{\partial^2}{\partial s \partial s'} \right] \frac{e^{-jk|r-r'|}}{4\pi|r-r'|} ds' ds \quad (18)$$

And the elements v_m are obtained from:

$$v_m = \int_s w_m E_s^l ds \quad (19)$$

And c_n are, of course, the unknowns of the system. In the literature the matrices of the systems (18) have special names. These are the following: $[Z_{mn}]$, impedance matrix; (c_n) , current matrix; and (v_m) , voltage matrix. Though their names remember us the Kirchhoff's equation of electric circuits, their real units are Ω , A/m and V/m , respectively. Nevertheless, if the length unit is taken as unitary, the units of (17) are then the same like the Kirchhoff's ones. So, the solution of (17) is written as:

$$(c_n) = [Z_{mn}]^{-1}(v_m) \quad (20)$$

Where some numerical technique could be used in order to get the inverse matrix $[Z_{mn}]^{-1}$.

5. THE POINT MATCHING SIMPLIFICATION TECHNIQUE

As we can see, each element of the system (17) consists in a double integration over the Helmholtz's operator and the Green's function. This could be a

very difficult task because the calculation time and programming efforts increases with N ; then we must find some simplifications in order to reduce the computational needs [11].

The first simplification is based upon the method of moments' technique known as *Point Matching Technique*. This technique uses the Dirac's delta function as weighting function. The properties of this function are the followings:

$$\int_{\Delta s} \delta(s - s_m) ds = \begin{cases} 1 & \text{if } s_m \in \Delta s \\ 0 & \text{elsewhere} \end{cases} \quad (21)$$

$$\int_{\Delta s} f(s) \delta(s - s_m) ds = \begin{cases} f(s_m) & \text{if } s_m \in \Delta s \\ 0 & \text{elsewhere} \end{cases}$$

By applying (21) into (18) and (19) we get:

$$Z_{mn} = -\frac{j}{\omega \epsilon} \int_{s'} i_n(s') \left[k^2 s \bullet s' + \frac{\partial^2}{\partial s \partial s'} \right] \frac{e^{-jk|r-r'|}}{4\pi|r-r'|} ds' \Bigg|_{s=s_m} \quad (22)$$

$$v_m = E_s^l(s = s_m)$$

Using Dirac's delta means that the boundary electromagnetic conditions are being applied only at discrete points on the wire's structure, exactly in the places where the Dirac's functions have their roots s_m . Choosing the places where the roots must be located is an important problem [12].

In this paper, the roots will be found in the axis of the wire, which means that we try to find the electric field in this place. A second simplification is to choose some basis function that could simplify the integration (22).

The one chosen is the pulse function that is defined by:

$$i_n(s') = \begin{cases} 1 & \text{if } (n-1)\Delta s' \leq s' < n\Delta s' \\ 0 & \text{elsewhere} \end{cases} \quad (23)$$

The pulse function divides the wire's structure into N segments of length $\Delta s'$, producing an stair representation of the structure current. The size of each segment must be freely chosen, however, in order to keep the linear independence of each equation of (17), usually the whole structure is equally divided, so the length of each segment is $\Delta s' = L/N$. By applying (23) into (22) we get:

$$Z_{mn} = -\frac{j}{\omega \epsilon} \int_{(n-1)\Delta s'}^{n\Delta s'} \left[k^2 s \bullet s' + \frac{\partial^2}{\partial s \partial s'} \right] \frac{e^{-jk|r-r'|}}{4\pi|r-r'|} ds' \Bigg|_{s=s_m} \quad (24)$$

6. THE KERNEL SIMPLIFICATION

Another simplification can be made. We note in (24), that the integral operator deals with an iterated differential operator; instead that the software makes such operation numerically each time for the impedance element, it is possible to develop the derivative operation. By using (12) we find the iterated derivative for Green's function:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial s \partial s'} \frac{e^{-jkR}}{R} &= -\frac{\partial}{\partial s'} \left[\frac{(1+jkR)e^{-jkR}}{R^2} \frac{\partial R}{\partial s} \right] \\ &= e^{-jkR} \frac{\left(\frac{\partial R}{\partial s} \right) \left(\frac{\partial R}{\partial s'} \right) [2 - k^2 R^2 + 2jkR] - R(1+jkR) \frac{\partial^2 R}{\partial s \partial s'}}{R^3} \end{aligned} \quad (25)$$

As we can see, we must find the value of the multiple derivatives of R that appears in the last equation. According to (11) and (12), we have:

$$\begin{aligned} \frac{\partial R}{\partial s'} &= \frac{1}{2R} \frac{\partial}{\partial s'} \{ [x(s) - x'(s')]^2 + [y(s) - y'(s')]^2 + [z(s) - z'(s')]^2 \} = -\frac{1}{R} \mathbf{R} \cdot \mathbf{s}' \\ \frac{\partial R}{\partial s} &= \frac{1}{2R} \frac{\partial}{\partial s} \{ [x(s) - x'(s')]^2 + [y(s) - y'(s')]^2 + [z(s) - z'(s')]^2 \} = \frac{1}{R} \mathbf{R} \cdot \mathbf{s} \\ \frac{\partial^2 R}{\partial s \partial s'} &= -\frac{1}{R} \left\{ \frac{\partial x'(s')}{\partial s'} \frac{\partial x(s)}{\partial s} + \frac{\partial y'(s')}{\partial s'} \frac{\partial y(s)}{\partial s} + \frac{\partial z'(s')}{\partial s'} \frac{\partial z(s)}{\partial s} \right\} + \mathbf{R} \cdot \mathbf{s}' \frac{1}{R^2} \frac{\partial R}{\partial s} \\ &= -\frac{1}{R} \mathbf{s} \cdot \mathbf{s}' + \frac{1}{R^3} (\mathbf{R} \cdot \mathbf{s})(\mathbf{R} \cdot \mathbf{s}') \end{aligned} \quad (26)$$

By substituting (26) in (25) we have:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial s \partial s'} \frac{e^{-jkR}}{R} &= e^{-jkR} \frac{R^2(1+jkR)\mathbf{s} \cdot \mathbf{s}' - (\mathbf{R} \cdot \mathbf{s}')(\mathbf{R} \cdot \mathbf{s})(3 - k^2 R^2 + 3jkR)}{R^5} \end{aligned} \quad (27)$$

By substituting (27) in (24) we get the simplified kernel of Pocklington's equation:

$$\begin{aligned} \left[k^2 \mathbf{s} \cdot \mathbf{s}' + \frac{\partial^2}{\partial s \partial s'} \right] \frac{e^{-jkR}}{4\pi R} &= \\ \left[R^2(1+jkR - k^2 R^2)\mathbf{s} \cdot \mathbf{s}' - (3+3jkR - k^2 R^2)(\mathbf{R} \cdot \mathbf{s})(\mathbf{R} \cdot \mathbf{s}') \right] \frac{e^{-jkR}}{4\pi R^5} \end{aligned} \quad (28)$$

So the elements of the impedance matrix are expressed for:

$$\begin{aligned} Z_{mn} &= -\frac{j}{4\pi\omega\epsilon} \int_{(n-1)\Delta s'}^{n\Delta s'} R^2(1+jkR - k^2 R^2)\mathbf{s} \cdot \mathbf{s}' \frac{e^{-jkR}}{R^5} ds' \Big|_{s=s_m} \\ &+ \frac{j}{4\pi\omega\epsilon} \int_{(n-1)\Delta s'}^{n\Delta s'} (3+3jkR - k^2 R^2)(\mathbf{R} \cdot \mathbf{s})(\mathbf{R} \cdot \mathbf{s}') \frac{e^{-jkR}}{R^5} ds' \Big|_{s=s_m} \end{aligned} \quad (29)$$

For the numerical integration of (29) the well known trapezoid rule could be used [13,14].

7. MODELING THE SOURCE

As we can see in (22) the elements of the matrix are the value of the impressed electric field in the roots of Dirac's delta. It means that we must know the value of the impressed electric field all over the structure. This could be as hard as knowing the current distribution in the conductor. The solution is to choose some source which will produce some known impressed electric field distribution on the conductor. Although there are known sources used for modeling the voltage matrix [Stutzman, op. cit], the most used, is the delta gap generator; this source supposes that the impressed electric field is different from zero only in the place where it is connected. Mathematically:

$$E_s^i(s) = \begin{cases} V/\Delta s & \text{if } s \in \Delta s_m \\ 0 & \text{elsewhere} \end{cases} \quad (30)$$

Where V is the value of the voltage fador of the source connected in the m th segment of the structure. The delta gap generator is a very idealized generator that could not be obtained in practice, however its use simplifies the solution and produces results with enough accuracy. In this way, if the antenna uses only one source connected at the m th segment, the voltage matrix will be:

$$(\mathbf{v}) = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_m \\ \vdots \\ v_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ V/\Delta s \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad (31)$$

The value of V is usually taken like 1, however, other choices could be made.

For considering impedances, we must apply the Kirchhoff's voltage law. If the impedance Z is connected at the m th segment, the potential difference in its ends is

$$V_m = v_m - c_m Z \quad (32)$$

Where c_m is the current in such segment. In this way, by substituting in (17) we have

$$\begin{pmatrix} Z_{11} & Z_{12} & \cdots & Z_{1m} & \cdots & Z_{1N} \\ Z_{21} & Z_{22} & \cdots & Z_{2m} & \cdots & Z_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ Z_{m1} & Z_{m2} & \cdots & Z_{mm} & \cdots & Z_{mN} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ Z_{N1} & Z_{N2} & \cdots & Z_{Nm} & \cdots & Z_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_m \\ \vdots \\ c_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_m - c_m Z \\ \vdots \\ v_N \end{pmatrix} \quad (33)$$

We can note that, by using the definition of matrix product, the m th element of the voltage matrix can be expressed like:

$$c_1 Z_{m1} + \dots + c_m Z_{mm} + \dots + c_N Z_{N1} = v_m - c_m Z \quad (34)$$

$$c_1 Z_{m1} + \dots + c_m (Z_{mm} + Z) + \dots + c_N Z_{N1} = v_m$$

So, the equation (33) can be written as:

$$\begin{bmatrix} Z_{11} & Z_{12} & \dots & Z_{1m} & \dots & Z_{1N} \\ Z_{21} & Z_{22} & \dots & Z_{2m} & \dots & Z_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ Z_{m1} & Z_{m2} & \dots & Z_{mm} + Z & \dots & Z_{mN} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ Z_{N1} & Z_{N2} & \dots & Z_{Nm} & \dots & Z_{NN} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_m \\ \vdots \\ c_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_m \\ \vdots \\ v_N \end{pmatrix} \quad (35)$$

Therefore, we conclude that connecting an impedance at the m th segment is the same than adding its value to the corresponding Z_{mm} matrix element.

8. CURRENT DISTRIBUTION IN A STRAIGHT LINEAR DIPOLE

The dipole antenna is very used in communication systems and is the most simple antenna ever made. The first step is to find the equation that describes its axis. If the antenna axis lies in the Z axis, as shown in Figure 3, its equation and its unit tangential vector is:

$$r(s) = sk \quad s'(s) = k \quad (37)$$

The next step is to choose the parallel curve that describes the current filament. For simplicity we choose the curve that lies over the YZ plane. Its equations are:

$$r'(s') = s'k + aj \quad s''(s') = k \quad (38)$$

The dipole is feeding in its central segment, so the voltage matrix will be:

$$(v_m) = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ V/\Delta s \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad (39)$$

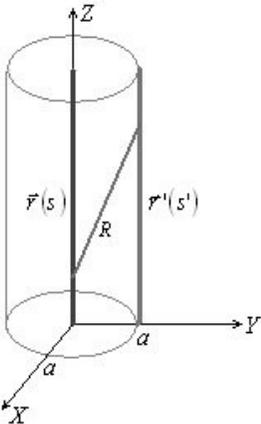


Figure 3. Dipole antenna and its associated vectors.

By using (37), (38) and (39) for a 2λ length dipole with the following characteristics:

$$f = 1\text{GHz} \quad N = 41 \text{ segments} \quad L = 2\lambda \\ a = 0.005\lambda \quad V = 1 \text{ volt}$$

The C++ program we developed produces the current distribution of Figure 4.

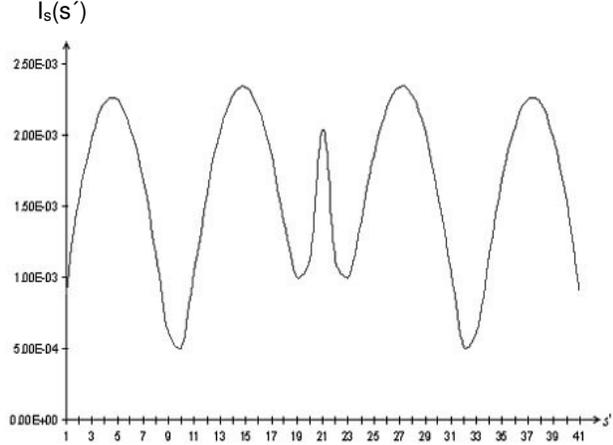


Figure 4. Current distribution for a 2λ length dipole antenna.

We can note that the current's magnitude at the 21th segment is 2.04099 mA, so the input impedance is:

$$|Z_{in}| = \frac{|V_{21}|}{|I_{21}|} = \frac{1 \text{ V}}{2.04099 \text{ mA}} = 489.95\Omega \quad (40)$$

The results are consistent with the expected ones cited by literature [Balanis, op. cit.].

9. CURRENT DISTRIBUTION IN A CIRCULAR LOOP ANTENNA

Following the same procedure for the circular loop antenna, we must find the vectorial equation for the axis and the filament curve. If the antenna has a radius A, as in Figure 5, then the equations are:

$$r(s) = A \cos\left(\frac{s}{A}\right)i + A \sin\left(\frac{s}{A}\right)j \quad (41)$$

$$s(s) = -\sin\left(\frac{s}{A}\right)i + \cos\left(\frac{s}{A}\right)j$$

Among the possible parallel curves we choose the simpler for the current filament, which is the one located at a distance a from the axis of the antenna; then the equations are:

$$r'(s') = A \cos\left(\frac{s'}{A}\right)i + A \sin\left(\frac{s'}{A}\right)j + ak \quad (42)$$

$$s'(s') = -\sin\left(\frac{s'}{A}\right)i + \cos\left(\frac{s'}{A}\right)j$$

It is clear that the parallel curve has the same length than the axis curve.

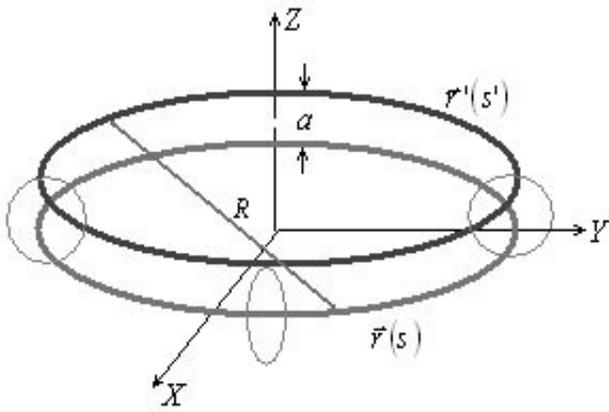


Figure 5. Circular loop antenna and its associated vectors.

The antenna is feeding in its ends, so the voltage matrix will be:

$$(v_m) = \begin{pmatrix} V/2\Delta s \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ -V/2\Delta s \end{pmatrix} \quad (43)$$

By using (41), (42) and (43) for a 3λ length circumference loop antenna with the following characteristics:

$$f = 1 \text{ GHz} \quad N = 41 \text{ segments} \quad 2\pi A = 3\lambda$$

$$A = 0.005\lambda \quad V = 1 \text{ volt}$$

The C++ program gives the curve of Figure 6. By looking at Figure 6 we can note that the current's magnitude in the ends has the same value, equal to 0.8015937 mA, so the input impedance is:

$$|Z_{in}| = \frac{|V_1|}{|I_1|} = \frac{1 \text{ V}}{0.8015937 \text{ mA}} = 1247.5147\Omega \quad (44)$$

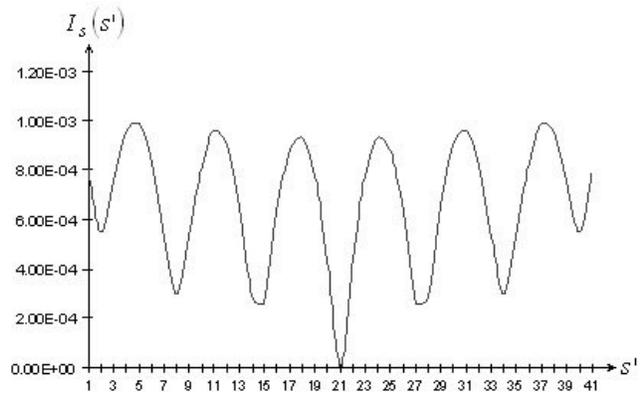


Figure 6. Current distribution for a 3λ length circumference loop antenna.

10. CONCLUSION

In this paper has been shown the general procedure for getting the current distribution in an arbitrary shaped wire. Its geometry has been taken into account in order to get a good representation of the wire through the relations among the vectors that describe the whole wire. There is not doubt that Pocklington's equation describes correctly the electromagnetic problem, so that the results have as good accuracy as the size of the programming efforts. The simplification of the integral equation's kernel brings computational simplification, reducing the computation time and the source code of the program. For any problem, the engineer just needs to specify the geometry of the antenna, the source and the load impedance.

In this first effort, the program only calculates the current distribution, but we are working for getting the current distribution graph and the radiation pattern plot, and a mathematical syntax analyzer for interpreting the vectorial equations of the antenna.

REFERENCES

1. SCHELKUNOFF, S.A. (1952): **Advanced Antenna Theory**. Ed. John Wiley & Sons.
2. F. HARRINGTON, ROGER (1967): "Matrix methods for field problems" in: **Proceedings of the IEEE**, February, 55(2), 136-149.
3. JONES, D.S. (1995): **Methods in Electromagnetic Wave Propagation**. OUP, 2nd edition.
4. A. BALANIS, CONSTANTINE: **Antenna theory, analysis and design**. 2nd edition, Ed. John Wiley & Sons, chapter 8.
5. L. STUTZMAN, WARREN and GARY A. THIELE (1998): **Antenna, theory and design**. 2nd edition, Ed. John Wiley & Sons, chapter 10.
6. MEI, K.K. (1965): "On the integral equations of thin wire antennas", in: **IEEE Trans. on Antennas and Propagation**, May, AP-13, 374-378.
7. TANG, C.H. (1963): "Input impedance of arc antennas and short helical radiators", in: **IEEE Trans. on Antennas and Propagation**, January, AP-12(1), 2-9.

8. BURKE, G.J. and A.J. POGGIO (1981): **Numerical Electromagnetics Code (NEC), Method of Moment**. 1st edition. Lawrence Livermore Laboratory. January, 87 p.
9. PANOFSKY, HERMAN and KURT WOLFWANG (1962): **Classical Electricity and Magnetism**. 2nd edition Addison Wesley Reading Massachussets, chapter 1.
10. BANCROFT, R. (1996): **Understanding Electromagnetic Scattering Using the Moment Method: a Practical Approach**. Artech House Inc.
11. WERNER, D.H.; P.L. WERNER and J.K. BREAKALL (1994): "Some computational aspects of Pocklington electric field integral equation for thin wires", in: **IEEE Trans. on Antennas and Propagation**, April, 42(4), 561-563.
12. LIN, Y. and L. SHAFAI (1985): "Moment-method solution of the near-field distribution and far-field patterns of microstrip antennas", in: **IEE Proc.** October, 132(6), 369-374.
13. "Numerical techniques for analysis of electromagnetic problems", in: **IEICE Trans. Commun.** March 2000, E83-B(3), 444-452.
14. DAVIES, P.J.; D.B. DUNCAN and S.A. FUNKEN (2001): "Accurate and Efficient Algorithms for Frequency Domain Scattering From A Thin Wire". **J. Comp. Physics**, 168, 155-183.

FINGERPRINTS OF NON EXTENSIVITY IN DNA FRAGMENT DISTRIBUTION

Oscar Sotolongo-Costa*, F. Guzman** y G.J. Rodgers*,***

*Cátedra de sistemas complejos "Henri Poincaré", Universidad de La Habana, Cuba

**Institute of Nuclear Sciences and Technology, Havana, Cuba

***Department of Mathematical Sciences, Brunel University, Uxbridge, Middlesex, UK

ABSTRACT

A formulation of DNA radiation- induced breaking based on Tsallis's generalized entropy concept is here introduced in order to explain the experimental data of DNA fragment distribution. We explicitly show that the process of breaking can be mathematically described using the most general principles of Physics. In this way, the maximum entropy method leads to an explicit result for the probability density of finding a DNA segment of length l , which agrees very well with the fragment distribution reported in the experiments.

RESUMEN

Una formulación de radiación de ADN basada en el concepto de entropía que generalizó Tsallis's se introduce aquí para explicar los datos experimentales de ADN, fragmento distribución. Se describe la muestra del proceso de ruptura que usa los principios más generales de Física. De esta manera matemáticamente el método de entropía de máximo lleva a un resultado explícito para la densidad de probabilidad de hallazgo de un segmento de ADN de longitud l en correspondencia con la distribución del fragmento que se informa en los experimentos.

I. INTRODUCTION

Atomic force microscopy (AFM) has revealed itself as an extremely useful device in the analysis of very small structures and specially in DNA fragment analysis [1].

As the ionizing radiation interacting with DNA molecules can influence the properties of living cells up to a lethal extreme, it is of great importance to study the production of fragments in DNA as a result of radiation mediated breaking processes.

A possible effect of the ionizing radiation is related to the production of fragments in DNA. The study of DNA lesion distribution is very important to increase the knowledge of the biological systems, whose more sensitive structures are DNA strands separated by a few nanometers.

On the other hand, DNA fragment analysis may help in the study of the structural properties of genome texts, and then to understand general principles of genetic sequences.

The process of DNA double strand breaking was performed by irradiation of plasmid DNA molecules with electrons and neutrons at different doses (see [1]). Then, the length of the resulting fragments was

measured. As a result, the collection of fragments was found to obey a fragment size distribution function (FSDF) with important characteristics from the viewpoint of complexity.

The main fact, which will be focused in this paper, is that the collection of fragments is such that there is not a "characteristic" size of the fragments, i.e. the smaller the fragment, the more abundant is it.

An important feature of the experiments is that the breakage was always performed with thermal neutrons or electrons so that the DNA strand breaking occurred in an indirect way, the radiation exciting the medium where the plasmids were dissolved and suffered breakage due to the molecular impact with the molecules of the solvent. So, there is no way to imagine DNA rupture in this case as the direct action of the radiation on the strands like "scissors cutting a strand". This experiment is in this case a genuine impact breakage, in which it is expected that the global properties of the strand must be expressed somehow in the results of the rupture. The controversial long range correlation in DNA must be expressed in this case, as we shall see. This is the main goal of this paper, in which we report first results of our group in this field.

E-mail: ¹oscarso@ff.oc.uh.cu

²fguzman@info.isctn.edu.cu

³g.j.rodgers@brunel.ac.uk

II. THE ENTROPIC VIEWPOINT

The FSDF obtained in this case in [1] does not present a definite local maximum, resembling more to an inverse power law, i.e., a distribution function in the basin of attraction of a stable (Levy) distribution [2].

This feature of the FSDF is not new. It has been reported in [3] the occurrence of transition to scaling in FSDF during glass rods breaking, in [4] the power law distribution of fragments was related to self-organized criticality (SOC). Matsushita [5] proposed a fractal representation for a general process of fragmentation.

Our group [6, 7] detected power law behavior in the process of liquid drop fragmentation and we proposed a Bethe lattice representation to interpret FSDF in these experiments.

Some attempts to relate FSDF to first principles in physics like the maximum entropy principle are present in [8, 9] with results that, at the best, do not cover the process in which scaling in FSDF is present. (i.e., when the energy of the fragmentation process is high).

The universal nature and almost unlimited range of applicability of the maximum entropy principle leads us to expect it to be useful in describing scaling in FSDF even at DNA scale.

But the process of fractionating, by its own nature, is a paradigm of phenomena in which interactions are long-range correlated among all parts of the object under fragmentation. Then, though the maximum entropy principle is expected to have an unlimited range of application, in the process of breaking the expression for the entropy in its Shannon form:

$$S = \int p(x) \log p(x) dx \quad (1)$$

where $p(x)dx$ is the probability of finding the system magnitude x in the interval $[x, x+dx]$, and k is Boltzmann's constant- is not applicable. This is because this formula, based in Boltzmann-Gibbs statistics, is expected to be valid when the effective microscopic interactions are short-ranged, and this gives to this entropy its extensive character. (The entropy of the whole object equals the sum of the entropies of its constituent independent parts)

Since, as we already pointed out, all parts of the fractionating object during the process of violent breakage are correlated, then the entropy of the object being fractionated is smaller than the sum of the entropies of the parts in which the object divides,

defining this way a "superextensivity" in this system. This suggests that it may be necessary to use non-extensive statistics, instead of the Boltzmann-Gibbs one.

This kind of theory has already been proposed by Tsallis [10], who postulated a generalized form of entropy, given by

$$S_q = k \frac{1 - \int p(x) dx}{q - 1} \quad (2)$$

where q is a real number.

This entropy can also be expressed as:

$$S_q = -k \int p(x) I_q p(x) dx \quad (3)$$

where the generalized logarithm $I_q p(x)$ is defined as (see [11]):

$$I_q p = \frac{p^{1-q} - 1}{1 - q} \quad (4)$$

It is straightforward to see that $S_q \rightarrow S$ when $q \rightarrow 1$, recovering Boltzmann-Gibbs statistics.

It is our goal to derive, starting from first principles, a functional dependence to describe the DNA FSDF obtained in [1].

Starting from equation \ref{eq:2} we may follow the method of Lagrange multipliers to apply the maximum entropy principle to the fragmentation of DNA. To do this, we impose two constraints: The first is the trivial one of normalization of the probability:

$$\int p(l) dl = 1 \quad (5)$$

i.e., the sum of the probabilities of finding a fragment of any length is equal to unity.

As a second constraint we may choose to adopt a "q-mean value" as:

$$\int p^q(l) dl = 1 \quad (6)$$

Which reduces to the classical mean value when $q \rightarrow 1$. In this formulation the length l of the fragments has been referred to a unit adequately chosen as to choose the "q-mean value" equal to one.

It may seem strange to introduce a "q-mean value", also known as "unnormalized mean value" in this formulation. Really, this choice is not unique but for our purposes and for simplicity reasons we will choose this formulation. In [11] a detailed discussion of the possible choices for the second constraint can be found. The one here chosen showed to be particularly useful in describing anomalous diffusion and was also employed by us in [12,13] dealing with problems of fragmentation.

Now we use the method of Lagrange multipliers by means of the construction of the functional:

$$L(p, \alpha, \beta) = \frac{S_q}{k} + \alpha \int p(l) dl - \beta \int p^q(l) dl \quad (7)$$

being α and β the Lagrange multipliers. The extremization of this functional leads to:

$$p(l) dl = \beta(2 - q) dl / [1 + \beta(q - 1)l]^{1/q-1} \quad (8)$$

III. COMPARISON WITH THE EXPERIMENTAL RESULTS

Equation 8 is the expression for the probability of finding a fragment of length l and depends on two coefficients to adjust. In this case we can apply this expression to fit it to the experimental data reported in [1], where methods of atomic force microscopy were applied to measure FSDF of irradiated DNA.

Figure 1 shown the experimental results for DNA breaking with electrons at doses of 5000 (e5000) and 7000 (e7000) Gy. Both are fitted with Equation 8.

Figure 2 represents FSDF for DNA breaking with neutrons at the same doses.

In both cases the length of the fragments was normalized to the length of the largest one, and the number of fragments was normalized to their total number. As can be seen, the agreement is very good. It is remarkable to see that the values of q in all cases are very similar. This fact reveals that the use of Tsallis's entropy is not a mere fitting tool.

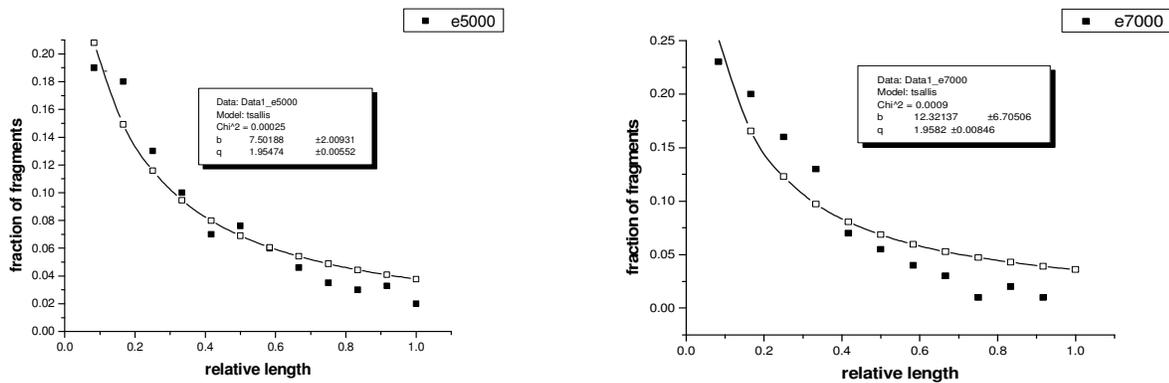


Figure 1.

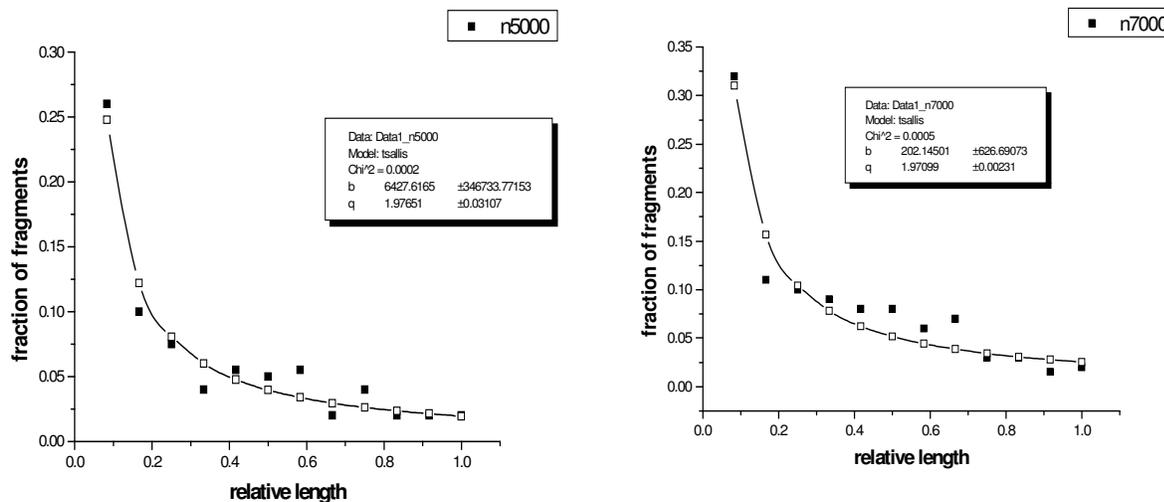


Figure 2.

The differences in the values of β are, nevertheless, remarkable specially between electrons and neutrons.

More experimental data for electrons from 50 to 200 Gy and neutrons at doses of 900, 7 500, 2 000 and 10 000 Gy were also fitted with good results. The wide range of variation for β and the narrow one for q is revealed in all cases. In this paper we are reporting the results of the coincident doses of electrons and neutrons of 5 000 and 7 000 Gy to illustrate the application of this viewpoint. Only in the cases of very low doses of electrons (50 and 100 Gy, where fluctuations in FSDF are important) the results are not as good looking as before.

The variation of β and, conversely, the almost constant value of q in all cases may lead to conclude that the effective temperature of the breaking processes is strongly influenced by the doses and masses of the radiating particles, whereas the non extensive nature of the process (measured by q) is independent of the nature of the radiation and is more related with intrinsic properties of the system under breakage. It is perhaps not unworthy to warn the reader that this is but a possible (though plausible) scenario which remains to be proved.

IV. CONCLUSIONS

This fact reveals the non extensive nature of breaking in DNA, as was revealed for macroscopic objects in [12, 13]. So, this characteristic of breaking is not exclusive of macroscopic bodies.

The relation of non extensivity in breaking with long range correlation in the structure of DNA is, thus, an open question that can be treated by this way. Indeed, it is tempting to induce structural long range correlation in DNA from the non extensivity observed in its FSDF.

Use of Boltzmann's entropy to describe FSDF obtained in these experiments leads to incorrect results (i.e., Eq. 9) impossible to fit with the data, which shows power law behavior.

The reported presence of $1/f$ spectrum in sequences and long-range correlations in the DNA sequences [14] supports the assertion that the observed FSDF reflects intrinsic properties of the DNA molecule. Further work on the relation between non extensivity and sequence correlations is in progress.

REFERENCES

1. PENG, D. (1997): **Atomic Force Microscopy investigation of electron and neutron induced DNA double strand breaks**. Ph. D. Thesis. The George Washington University, Washington D.C.
2. FELLER, W. (1966): **An Introduction to Probability Theory and Applications 2**, Wiley, New York.
3. ISHII, T. and M. MATSUSHITA (1992): **J. Phys. Soc. Jpn.** 61, 3474.
4. ODDERSHEDE, L.; P. DIMON and J. BOHR (1993): **Phys. Rev. Lett.** 71, 3107.
5. MATSUSHITA, M. (1985): **J. Phys. Soc. Jpn.** 54, 857.
6. SOTOLONGO-COSTA, O.; E. LÓPEZ; F. BARRERAS, J. MARIN (1994): **Phys. Rev. E.** 49, 4027.
7. SOTOLONGO-COSTA, O.; Y. MORENO; J. LLOVERAS and J.C. ANTORANZ (1996): **Phys. Rev. Lett.** 76, 42.
8. ENGLMAN, R.; N. RIVIER and Z. JAEGER (1987): **Phil. Mag.** 65, 751.
9. LI, X. and R.S. TANKIN (1987): **Combust. Sci. and Tech.** 56, 65.
10. TSALLIS, C. (1988): **J. Stat. Phys.** 52, 479.
11. _____ (1999): **Brazilian J. Phys.** 29, 1.
12. SOTOLONGO-COSTA, O.; AREZKY H. RODRÍGUEZ and G. J. RODGERS (2000): **Entropy** 2, 172. (<http://www.mdpi.org/entropy>)
13. _____ (2000): **Physica A** 286, 210-214.
14. VOOS, R.F. (1992): **Phys. Rev. Lett.** 68, 3805. See also M. de Sousa Vieira cond-matt/9905074.

SIMULACIÓN DE SISTEMAS MAGNÉTICOS BIDIMENSIONALES CON INTERACCIÓN DIPOLAR

Rogelio Iliaz- Méndez¹, Departamento de Física. Facultad de Eléctrica, ISPJAE
Laboratorio de Superconductividad. Facultad de Física-IMRE.
Cátedra de Sistemas Complejos "Henri Poincaré". Universidad de La Habana
Roberto Mulet², Laboratorio de Superconductividad. Facultad de Física-IMRE
Cátedra de Sistemas Complejos "Henri Poincaré", Universidad de La Habana

RESUMEN

Se estudian las propiedades estáticas y dinámicas de material magnético ultrafino a través de una simulación de Monte Carlo en un módulo bidimensional de espines de Ising con interacciones de intercambio y dipolar magnético, de intensidades J y g respectivamente. Adaptando las sumas de Ewald al caso magnético en 2D reproducimos el diagrama de fases en (T, δ) del sistema, donde $\delta = J/g$, reportando la existencia de una nueva región de meta-estabilidad. Demostramos que la relajación al equilibrio es diferente si el sistema va a un estado antiferromagnético que sí relaja a un estado de franjas, y proporcionamos una posible explicación basada en la dinámica de dominios.

ABSTRACT

The static and dynamical properties of thin magnetic films are studied through Montecarlo simulations in a two-dimensional system of Ising spins with exchange and long-range dipolar interactions of strength J and g respectively. Adapting the Ewald Sums for the 2D magnetic case we reproduce the phase diagram of the system, reporting a new metastability region. We demonstrate that the way of relax to equilibrium depends on whether the system is going to an antiferromagnetic state or to a stripes one, giving an interpretation based in the domain dynamics.

1. INTRODUCCIÓN

En los últimos años se viene prestando una especial atención al problema de los sistemas magnéticos bidimensionales. Las películas delgadas y materiales cuasi-bidimensionales son extremadamente útiles en la electrónica, en el almacenamiento de información, en la regulación de los procesos de catálisis, y en el caso de películas moleculares; también en la interpretación de procesos biotecnológicos y farmacológicos. Las nuevas técnicas de crecimiento, así como los avances recientes en epitaxia de haces moleculares y en métodos de caracterización magneto-ópticos de superficie, pronostican, además, una gran variedad de aplicaciones tecnológicas futuras.

Pero no es solo la inminente influencia práctica quien mueve al estudio de este tipo de sistema; desde el punto de vista teórico ellos se convierten en una prueba importante de nuestra comprensión de las interacciones atómicas y moleculares. Más aún, en ellos tienen lugar una buena cantidad de fenómenos interesantes y extraños, muchos de los cuales recién comienzan a comprenderse y se sitúan en la frontera del conocimiento científico.

Hoy es un hecho experimental comprobado que los procesos de magnetización de películas ultrafinas están regulados por la competencia entre el acoplamiento ferromagnético de corto alcance, de un lado y la interacción dipolar antiferromagnética de largo alcance, de otro. Esta competencia da lugar a lo que se conoce en Física como un *sistema frustrado*, que no es más que un sistema en el cual las entidades individuales que lo componen (espines, bosones, fermiones, monómeros), no son capaces de satisfacer todas las interacciones presentes en la búsqueda de una configuración de mínima energía.

En este momento, la simulación computacional cobra especial importancia en la investigación de las propiedades físicas que se producen debido a la frustración. Un serio esfuerzo se ha hecho últimamente por comprender tanto el equilibrio^{[1],[2],[3]} como el no-equilibrio^{[4],[5],[6]} en los materiales magnéticos bidimensionales.

Se conoce desde hace algún tiempo, que a medida que un sistema magnético dado se hace más bidimensional, los espines tenderán a orientarse fuera del plano. Bajo estas circunstancias podremos usar una representación uniaxial tipo Ising para

E-mail: ¹rogelio@fisica.uh.cu
²mulet@fisica.uh.cu .

describir al sistema de espines^{[7],[8]}. Tendremos entonces un sistema cuadrado $L \times L$ descrito por el Hamiltoniano

$$H = -\delta \sum_{\langle ij \rangle} \mu_i \mu_j + \sum_{\langle i \neq j \rangle} \frac{\mu_i \mu_j}{r_{ij}^3}, \quad (1)$$

donde los corchetes triangulares $\langle \dots \rangle$ indican que la primera sumatoria es solo sobre los pares de vecinos más cercanos, la segunda ($i \neq j$) es sobre todos los pares de espines, $\mu_i = \pm 1$ representa al espín que se encuentra en el sitio i , mientras que $\delta = J/g$ es un parámetro que nos habla de la relación entre la intensidad de las interacciones dipolar y de intercambio.

Maclsaac y colaboradores demostraron en 1995^[2] que el estado fundamental del hamiltoniano (1) es el antiferromagnético para $\delta < 0.85$ mientras que para $\delta > 0.85$ este resultado se hace inestable con respecto a la formación de estructuras de franjas.

En estas estructuras, los dominios de espines se alinean a lo largo de un eje formando una franja ferromagnética de grosor h , de tal forma que los espines de franjas adyacentes son antiparalelos y forman una superred de periodo $2h$ (en unidades de la constante de la red) en la dirección perpendicular a las franjas.

Se ha demostrado también (y comprobado además en simulaciones de Monte Carlo para redes finitas a bajas temperaturas^{[2],[4]}) que las fases de franjas de gran espesor se hacen más estables a medida que aumenta δ , más estables aún que la fase ferromagnética para valores de δ arbitrariamente largos.

Por otra parte, producto de la competencia entre las interacciones dipolar y de intercambio, parece haber consenso en cuanto a que la dinámica de este sistema está caracterizada por la formación y crecimiento de dominios magnéticos que generan, a bajas temperaturas, grandes tiempos de relajación. Estudios de Monte Carlo a bajas temperaturas^[4] reportan la existencia de dos regímenes dinámicos diferentes, cuya aparición depende del valor de δ . Así, para $\delta > \delta_c \cong 2.7$ la magnetización relaja exponencialmente con un tiempo de relajación que depende de la temperatura T del sistema y de δ , mientras que para $\delta < \delta_c$ la magnetización decae como una ley de potencia con un exponente independiente de δ .

Este fenómeno es explicado por Sampaio y colaboradores^[4] a través de la formación de diferentes patrones de dominio: para $\delta > \delta_c$ se nuclea unos pocos dominios que rápidamente crecen de tamaño como un solo conglomerado, mientras que para $\delta < \delta_c$ sucede que son muchos los dominios que surgen en un primer momento en diferentes puntos del sistema.

Fuertes histéresis^{[4],[9]} para $\delta > \delta_c$ (ausentes para $\delta < \delta_c$), fenómenos de envejecimiento,^[9] así como algunos estudios sobre la violación del Teorema de Fluctuación-Disipación^[6] son otros de los resultados recientes de la investigación en este tema.

En la sección 2 de este trabajo estudiamos el diagrama de fases, donde reportamos la existencia de una nueva zona de metaestabilidad entre fases para bajos valores de δ . En la sección 3 estudiamos la dinámica del sistema fuera del equilibrio, ahí se comprueba la existencia de envejecimiento para enfriamientos rápidos en cualquier zona del diagrama y se encuentra que la relajación es diferente si el enfriamiento es hacia un estado fundamental antiferro que hacia una fase de franjas. En la sección 4 están resumidas las condiciones del trabajo.

2. SIMULACIONES DE EQUILIBRIO

La evolución del sistema se estudió utilizando el algoritmo de Metrópolis. En todos los casos presentados, se trató un sistema con condiciones de frontera periódicas, es decir, que alrededor del sistema se extienden infinitas réplicas del mismo. El potencial de interacción dipolar en esas circunstancias se halló mediante la implementación de las Sumas de Ewald. Todo este procedimiento, así como otros detalles de la simulación están explicados más exhaustivamente en la referencia [10].

Para sistemas con $L = 32$ llevamos a cabo simulaciones concentradas en la región de bajas temperaturas con valores entre $\delta = 0$ y $\delta = 4$; y para cada uno de los valores de δ analizados se hizo una simulación que recogiera los parámetros fundamentales del sistema en función de la temperatura.

La Figura 1 muestra el comportamiento del calor específico contra la temperatura para tres valores de δ . Estas gráficas se obtuvieron promediando, para cada valor de δ , los resultados de 100 barridos de temperatura entre $T = 3$ y $T = 0$ usando la dinámica de Metropolis^[12]. En este rango se midieron 100 valores de T y en cada uno de ellos el sistema relajo un tiempo $t_r = 100$; todas las magnitudes temporales en este artículo se darán en pasos montecarlo por sitio^[10] (mcs) y para una mejor comprensión de las unidades de las otras magnitudes físicas (temperatura, calor específico, susceptibilidad) puede consultarse la referencia^[11].

La figura muestra con claridad un máximo del calor específico C como función de T para diferentes valores de δ , lo cual sugiere la existencia de una transición de fase entre un estado desordenado y uno ordenado. El valor de la temperatura a la que ocurre la transición varía con δ .

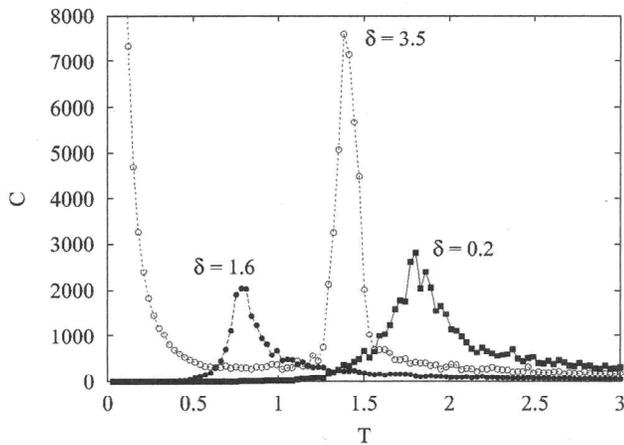


Figura 1. Comportamiento del calor específico contra la temperatura para diferentes valores de δ en un sistema 32×32 .

Las Figuras 2, 3 y 4 muestran la configuración alcanzada por el sistema para tres valores diferentes de δ como función de la temperatura. Los cuadros oscuros representan espines hacia abajo y los claros espines hacia arriba. Para cada valor de δ se fotografiaron tres configuraciones representativas, a saber, la de más alta temperatura, la de temperatura más baja y una de temperatura cercana a la transición de fase. Vemos que en todos los casos se llega, cuando las temperaturas son bajas, a estructuras ordenadas y, además, en los rangos de δ predichos por la literatura científica del tema. Es decir, para $\delta = 0.2$ se tiene un antiferromagnético (h_0), para $\delta = 1.6$ una fase de franjas de ancho 1 (h_1) y para $\delta = 3.5$ franjas de ancho 2 (h_2).

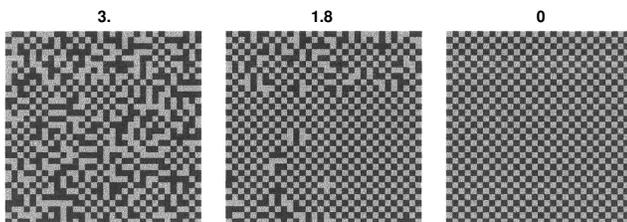


Figura 2. Configuraciones de equilibrio del sistema para $T = 3$, $T = 1.8$ y $T = 0$ con $\delta = 0.2$. Los cuadros claros representan espines hacia arriba y los cuadros oscuros hacia abajo.

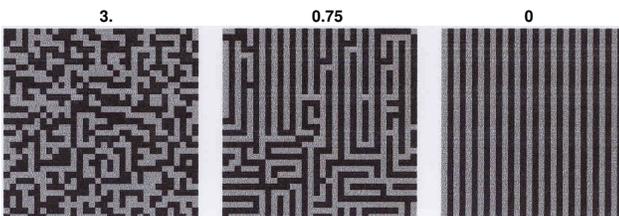


Figura 3. Configuraciones de equilibrio del sistema para $T = 3$, $T = 0.75$ y $T = 0$ con $\delta = 1.6$. Los cuadros claros representan espines hacia arriba y los cuadros oscuros hacia abajo.

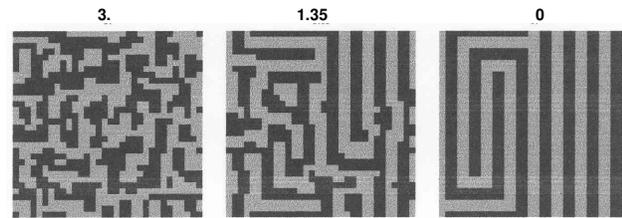


Figura 4. Configuraciones de equilibrio del sistema para $T = 3$, $T = 1.35$ y $T = 0$ con $\delta = 3.5$. Los cuadros claros representan espines hacia arriba y los cuadros oscuros hacia abajo.

No obstante, para $\delta = 3.5$ deben hacerse algunas observaciones interesantes. Primero, ya en la Figura 1 el valor del calor específico hemos visto que aparentemente diverge para valores de temperatura muy pequeños. Pues bien, si a esto se le añade el comportamiento que observamos en la Figura 4, donde parece que el sistema ha quedado atrapado en un mínimo local, es claro que estamos en presencia de un punto importante a esclarecer. En un trabajo de Yan Mu y colaboradores^[13] publicado en el 2002 se reporta a muy bajas temperaturas una nueva transición de fase, ahora hacia un estado estructuralmente diferenciado llamado “laberíntico”, no tan desordenado como la fase paramagnética ni tan ordenado como la fase ordenada de franjas.

La naturaleza de este hallazgo, obtenido también mediante simulaciones de Monte Carlo, carece aún de una explicación sólida como bien expresan Mu y colaboradores citando la referencia [15] y estimulando estudios posteriores sobre el tema. Es probable que nuestros resultados estén en concordancia con el hallazgo de Mu, aunque la divergencia en aquel caso es mucho más modesta.

Para estudiar la estabilidad de las configuraciones hacemos uso de la magnetización inhomogénea (*staggered magnetization*) M_S que definida para cada configuración (M_{S0} , M_{S1} y M_{S2}) vale 0 si el sistema está desordenado y 1 si se encuentra en la configuración dada (h_0 , h_1 o h_2 , respectivamente).

La Figura 5 se obtuvo tomando un sistema a $T = 0$ con una configuración determinada (h_0 o h_1), ahí se incrementa poco a poco la temperatura y se deja relajar una cantidad suficiente de pasos de montecarlo (100 mcs). En cada temperatura se mide M_S y su susceptibilidad inhomogénea equivalente χ_S . Es claro que existe una temperatura en la cual la configuración impuesta deja de ser estable. Interesante es el hecho de que para un mismo valor de δ y de T pueden ser estables varias configuraciones.

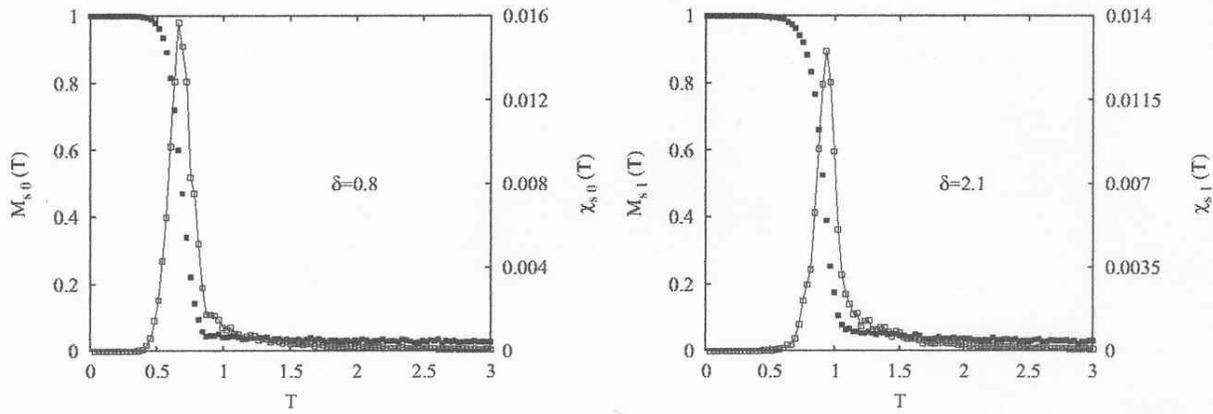


Figura 5. Comportamiento de la magnetización (cuadros negros) y la susceptibilidad inhomogéneas (cuadros blancos) correspondiente h_0 y h_1 para los valores $\delta = 0.8$ y $\delta = 2.1$ respectivamente.

En el diagrama de fases (Figura 6), la línea de cuadrados negros divide al diagrama en una región paramagnética arriba y otra ordenada abajo, mientras que las tres configuraciones ordenadas son estables abajo y no arriba de sus respectivas líneas blancas. Esto nos lleva rápidamente a la identificación de las diferentes zonas por sus patrones de orientación magnética, como está indicado en la figura.

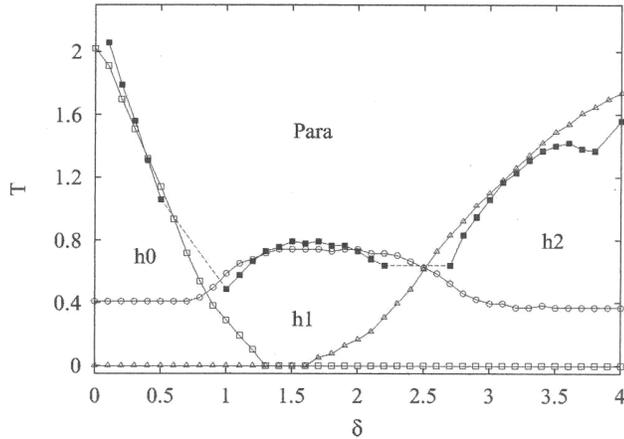


Figura 6. Diagrama de fases para un sistema 32×32 . Los cuadrados negros muestran la transición para-ordenado, los cuadrados blancos la estabilidad de h_0 , los círculos blancos la estabilidad de h_1 y los triángulos blancos la estabilidad de h_2 . Las líneas quebradas van sobre los intervalos de δ donde la transición de fases no se detectó.

Lo que nos llama la atención entonces, es que aparte de las regiones paramagnética y ordenadas "puras", se ven regiones "metaestables" donde coexisten (o pueden coexistir) más de una fase de franjas. Este resultado, obtenido por Pablo Gleiser y colaboradores^[14] en el año 2001, fue reportado para la región de metaestabilidad h_1 - h_2 . En nuestro trabajo, reportamos la zona metaestable h_0 - h_1 .

Para ciertos valores de la relación entre la intensidad de las interacciones

$$\delta \in (0.5; 1) \cup (2.2; 2.7) \quad (2)$$

sucede que no es posible determinar si existe una transición de fase (note las líneas discontinuas en la Figura 6), es decir, la intensidad del pico, en el calor específico y la susceptibilidad, es demasiado pobre o virtualmente no existe. Esto puede ser debido a que en estas zonas se necesita un mayor tiempo para equilibrar t_r , o redes de mayor tamaño. Una cosa sí es clara, estas regiones están siempre alrededor del punto en que tanto h_0 y h_1 en un caso, como h_1 y h_2 en el otro, son igualmente estables con la temperatura. Dicho de otra manera, las regiones dadas en (2) marcan los dos cambios que tiene la configuración estable que más temperatura soporta, siguiendo los valores de δ .

3. ESTUDIO DE RELAJACIÓN

Las propiedades dinámicas se estudiaron haciendo enfriamientos rápidos a sistemas 16×16 en equilibrio a $T = \infty$. Esto es, a una configuración con los espines orientados aleatoriamente se la somete de forma instantánea a una evolución temporal en alguna temperatura inferior a la temperatura de transición.

Análogo al experimento de enfriamiento a campo cero (*zero field cooling*), luego de un tiempo de espera t_w (en el que el sistema va relajándose en busca del equilibrio en una zona de orden del espacio de fases) comienzan a medirse las propiedades de la relajación. La magnetización, la energía y otros parámetros de interés son así registrados junto a la función de autocorrelación espín-espín

$$C(t_w, t) = \frac{1}{N} \left\langle \sum_i^N \sigma_i(t_w) \sigma_i(t_w + t) \right\rangle. \quad (3)$$

donde la sumatoria va por todos los espines del sistema y los corchetes triangulares indican una promediación sobre diferentes ensembles.

Esta función guarda una estrecha relación con las funciones de respuesta del sistema a través del Teorema de Fluctuación Disipación. Para sistemas "convencionales" la función $C(t_0, t)$ no depende de t_0 , o sea, es invariante ante una traslación temporal. Cuando t_0 se convierte en un parámetro relevante, estaremos en presencia de un sistema vidrioso con envejecimiento.

A través de los enfriamientos descritos, el estudio se concentró en las tres zonas ordenadas, donde está bien definido el estado de equilibrio. Se tuvo además el cuidado de tomar la temperatura del enfriamiento (para el valor de δ en cada zona) siempre en la misma proporción con relación a la temperatura crítica de la transición para-ordenado; penetrando de esta forma a la misma "profundidad" por debajo de la línea de transición. Los enfriamientos en cada zona y la relación vienen dados en el Cuadro 1.

El comportamiento de la función de autocorrelación (3) en nuestros experimentos se muestra en las Figuras 7 y 8. Es evidente que $C(t_0, t)$ depende de t_0 para todos los valores de δ estudiados, esto es, el sistema presenta envejecimiento.

Este resultado se encontró ya en 1998^[9], también mediante simulaciones de Monte Carlo pero sin el cálculo del aporte energético que incorporan las Sumas de Ewald.

No obstante, en el trabajo citado se reportan dos regímenes de escalamiento diferentes: para $\delta < \delta_c$ el escalamiento dinámico es del tipo

$$C(t_0, t) \propto c_\delta [\ln(t)/\ln(t_0^a)],$$

mientras que para $\delta > \delta_c$

$$C(t_0, t) \propto c_\delta [t/t_0^a]$$

con el valor $a = 0.83$ para $\delta = 2$ y $a = 1$ para $\delta = 4$.

Cuadro 1. Valores de d , T y $T_c(d)$ para las tres regiones en que se hicieron los enfriamientos.

	δ	T	T_c	T/T_c
h0	0.2	0.92	1.79	$\cong 1.95$
h1	1.6	0.4	1.78	$\cong 1.95$
h2	3.5	0.72	1.4	$\cong 1.95$

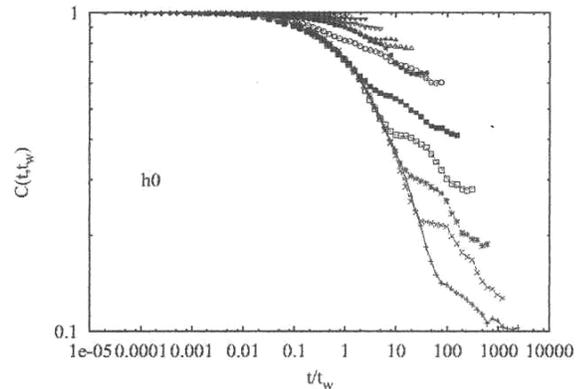
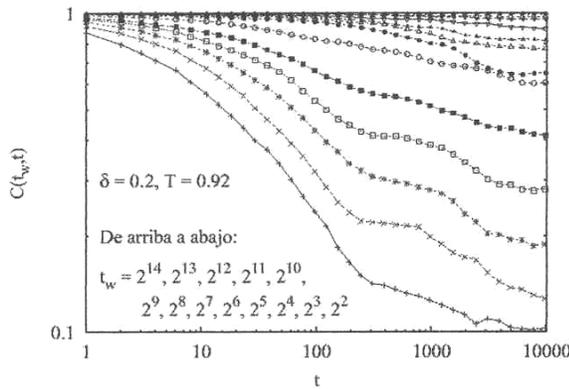


Figura 7. De izquierda a derecha: función de autocorrelación espín-espín contra t para varios t_0 y su escalamiento contra t/t_0 . Enfriamiento en la zona h0.

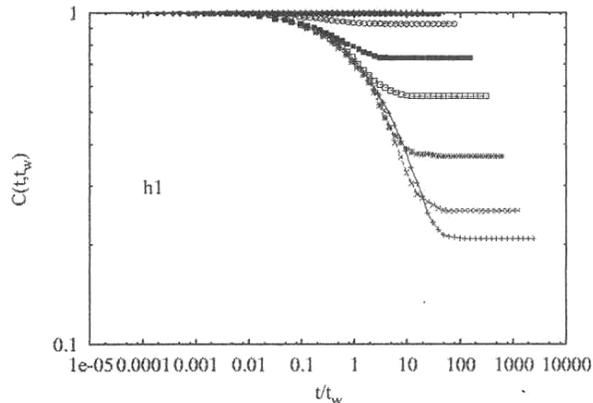
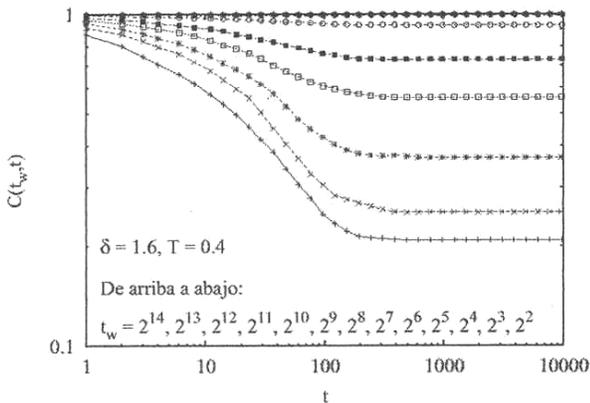


Figura 8. De izquierda a derecha: función de autocorrelación espín-espín contra t para varios t_w y su escalamiento contra t/t_w . Enfriamiento en la zona h1.

En nuestro caso hay una región de t , digamos un tiempo característico, en el cual el sistema relaja de la misma forma independientemente del valor de δ . Así se observa en el colapso de las curvas en las Figuras 7 y 8. Aquí el escalamiento siempre será

$$C(t_0, t) \propto c_\delta [t / t_0],$$

sin tomar en consideración, claro, la región del *plateau* (o la región final en el caso de h_0).

El estudio sobre envejecimiento que citamos es anterior al reporte de la zona metaestable h_1 - h_2 , esto indica que quizás en él no se tuvo cuidado de bajar a una fase pura y entonces la no correspondencia entre aquel y nuestro trabajo puede estar explicada en la referencia [5]. Allí, estudiando la dinámica de un sistema enfriado hacia la zona metaestable h_1 - h_2 , se sugiere que la configuración metaestable se asocia, en la relajación, con dominios que bloquean el crecimiento de una de las fases. De esta forma, el lento crecimiento de dominios para tiempos intermedios sería indistinguible de una ley logarítmica y eso podría ser la causa del aparente escalamiento logarítmico observado en [9].

En la Figura 8 la función de autocorrelación permanece constante después del tiempo característico (tiempo de colapso). Sin embargo, para el enfriamiento en h_0 de la Figura 7, al seguir relajando la autocorrelación, parece como si existieran dos formas distintas de comportamiento.

Para una mejor comprensión de las diferencias dinámicas entre h_0 y las otras configuraciones se presenta la Figura 9,* que muestra las características de la relajación de la energía en h_0 y h_1 **.

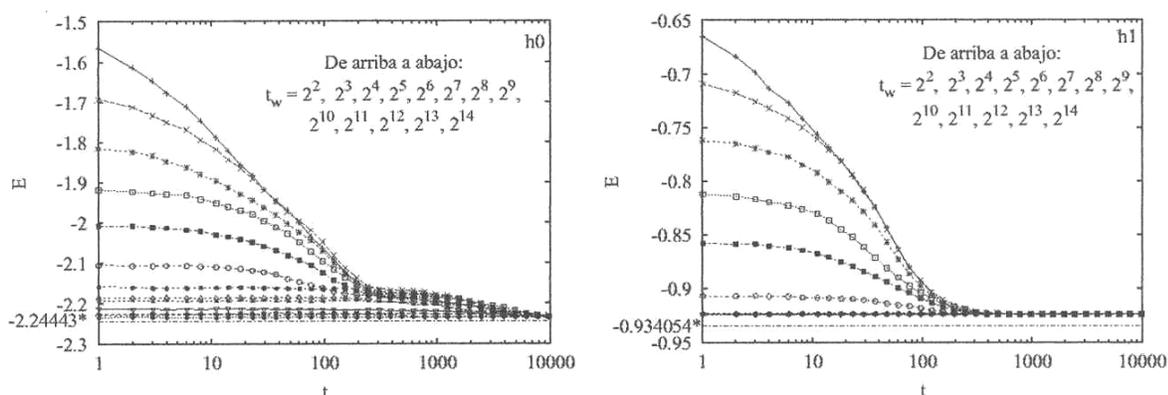


Figura. 9. Evolución de la energía por espín durante los enfriamientos en h_0 y h_1 . El valor resaltado es la energía del estado básico.

El comportamiento de la energía en el tiempo parece dejar claro que en h_0 hay dos formas diferentes de relajación dependientes del tiempo. Durante el tiempo característico que ya mencionamos, tanto en h_0 como en h_1 se busca el mínimo de energía de la misma manera; a partir de entonces, h_1 (Figura 9, izquierda) queda atrapado en un estado de mínimo local, esto es, congelado en una configuración de la que es muy difícil salir siguiendo una dinámica de Metropolis.

En la configuración h_0 (Figura 9, derecha), sin embargo, una vez transcurrido el tiempo característico se sigue relajando, aunque de forma marcadamente diferente, hacia el estado fundamental.

La observación de Sampaio^[4] comentada en la sección 1 se detectó utilizando condiciones de frontera semiabiertas. Así pudieron trabajar sistemas grandes de hasta 256×256 y estudiar bien las características de crecimiento de los patrones de dominio.

Nosotros creemos que esto sin dudas pasa, solo que al estar trabajando sistemas de 16×16 no es posible detectar semejante comportamiento. En cuanto al comportamiento de la autocorrelación y la energía para los enfriamientos en h_0 y h_1 , sostenemos que en un primer momento del cambio brusco de temperatura se nuclean "muchos" dominios que comienzan a crecer de tamaño y rápidamente se encuentran. Hasta aquí ha transcurrido prácticamente todo el tiempo característico.

Ahora, en el caso de la zona h_0 , como existen dos posibles orientaciones que minimizan la energía y los dominios formados pertenecen aleatoriamente a una de estas, todos ellos comienzan a competir

*La energía del estado básico para el sistema en los valores dados de T y δ se obtuvo de las simulaciones de estabilidad.
 **El comportamiento de la energía, así como de la autocorrelación) en la configuración h_2 es análogo al de h_1 , por eso tomamos a este para el análisis.

entre sí, dando como resultado el crecimiento de una de las orientaciones que acercará (pero mucho más lentamente que en la primera etapa) al sistema a su estado fundamental. Así, la relajación en h_0 tendrá claramente dos etapas, una relacionada con el crecimiento libre de los dos tipos de dominio antiferro-magnético (en la que la energía disminuye rápidamente), y otra asociada a la dinámica de las fronteras de dominio donde cada orientación trata de imponerse poco a poco sobre la otra. La Figura 10 muestra una de estas evoluciones en nuestro experimento.

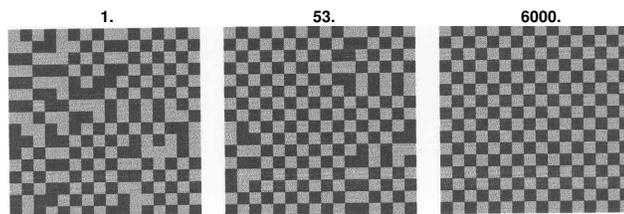


Figura 10. Configuraciones de un sistema tras un enfriamiento rápido sobre la zona h_0 con $t_w = 4$ en el transcurso del tiempo. De izquierda a derecha $t = 1, 53, 6000$. Los cuadros claros representan espines hacia arriba y los oscuros hacia abajo.

El análisis de la zona h_1 sería análogo si no fuera porque aquí no hay dos orientaciones posibles sino cuatro. Por tanto, luego de transcurrida la primera etapa de la relajación, es muy difícil para el sistema en la fase h_1 invertir los espines de $3/4$ de los dominios. De esta manera, el sistema se congelará en una fase que no corresponde con el estado fundamental. La Figura 11 muestra tres configuraciones del sistema para h_1 en el transcurso del tiempo de un experimento.

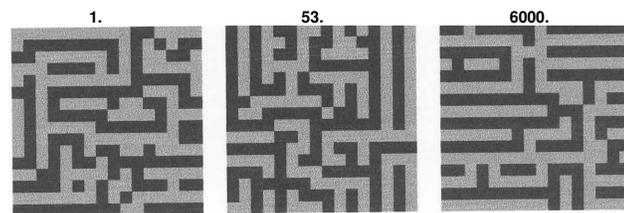


Figura 11. Configuraciones de un sistema tras un enfriamiento rápido sobre la zona h_1 con $t_w = 4$ en el transcurso del tiempo. De izquierda a derecha $t = 1, 53, 6000$. Los cuadros claros representan espines hacia arriba y los oscuros hacia abajo.

4. CONCLUSIONES

En este trabajo hemos estudiado, mediante la implementación de un algoritmo de Monte Carlo y la deducción de las Sumas de Ewald para el potencial magnético en 2D, algunas propiedades de un modelo magnético o bidimensional de espines de Ising con interacciones competitivas de corto y largo alcance.

En las simulaciones de estática se determinó el diagrama de fases del sistema a bajas temperaturas, detectándose una fase metaestable donde coexisten patrones h_0 con h_1 . Es probable que hayamos encontrado además las fases laberínticas predichas en la referencia [13]. En cuanto a la dinámica del sistema, no encontramos comportamientos diferentes alrededor de δ_c como se reportó en [4], al

parecer debido al tamaño de los sistemas que utilizamos. No obstante, sí se aprecia un comportamiento diferente de la relajación entre la configuración antiferro y las de franjas de espines. Todo parece indicar que en el caso en que se relaja a franjas, el sistema queda atrapado en un equilibrio no fundamental producido por la compleja dinámica en las fronteras de dominio.

5. AGRADECIMIENTOS

Muy útiles han sido para este trabajo las discusiones sostenidas con el Lic. Danny Martínez-Pedrerá, en particular aquellas sobre las Sumas de Ewald. Todas las simulaciones de estática se beneficiaron, además, con las facilidades de cálculo brindadas por el Lic. Roberto Vera de CIGB.

REFERENCIAS

- [1] KASHUBA, A. and K. L. POKROVSKY (1993): **Phys. Rev. Lett.** 10, 3155.
- [2] MacISAAC, A.B.; J.O. WHITEHEAD; M.C. ROBINSON and K. De' BELL (1995): **Phys. Rev. B.** 51, 16033.
- [3] De'BELL, K.; A.D. MacISAAC and J.P. WHITEHEAD (2000): **Rev. Mod. Phys.** 72, 225.
- [4] SAMPAIO, L.C.; M. P. de ALBUQUERQUE and F. S. de Menezes (1996): **Phys. Rev. B.** 54, 6465.
- [5] GLEISER, P.M.; F.A. TAMARIT; S.A. CANNAS and M. A. MONTEMURRO, cond-mat/0212617.

- [6] STARIOLO, D.A. and S.A. CANNAS (1999): **Phys. Rev. B.** 60, 3013 (1999).
- [7] ALLENSPACH, R.; M. STAMPANONI and A. BISCHOF (1990): **Phys. Rev. Lett.** 65, 3344.
- [8] ALLENSPACH, R. and A. BISCHOF (1992): **Phys. Rev. Lett.** 69, 3385.
- [9] TOLOZA, J.H.; F.A. TAMARIT and S.A. CANNAS (1998): **Phys. Rev. B.** 58, R8885.
- [10] DÍAZ-MÉNDEZ, R. (2003): Tesis de Diploma. Facultad de Física, Universidad de La Habana.
- [11] NEWMAN, M.E. and G.T. BARKEMA (1999): **Monte Carlo Methods in Statistical Physics.** Clarendon Press, Oxford.
- [12] METROPOLIS, N. **et al.** (1953): **J. Chem. Phys.** 21, 1087-92.
- [13] MU, Y. and Y. MA (2002): **J. Chem. Phys.** 117, 1686.
- [14] GLEISER, P.M.; F.A. TAMARIT and S.A. CANNAS cond-mat/0110182.
- [15] SANTEN, L. and W. KRAUTH (2000): **Nature** (London) 405, 550.

MODELANDO VÓRTICES TIPO “PANCAKE” MEDIANTE ARREGLOS DE IMANES

L. del Río, C. Noda y E. Altshuler, Laboratorio de Superconductividad IMRE, Facultad de Física, Universidad de La Habana, Habana, Cuba

RESUMEN

En este trabajo desarrollamos y estudiamos un modelo macroscópico basado en imanes, para facilitar la comprensión de varias propiedades de los vórtices tipo “pancake”, que aparecen en los superconductores de alta temperatura crítica. Aunque la naturaleza misma de las interacciones entre los imanes del modelo es bien diferente de las que tiene lugar entre los vórtices, nuestros cálculos demuestran que la dependencia de las energías involucradas respecto a ciertos parámetros geométricos es sorprendentemente similar en ambos sistemas, al menos cualitativamente. Finalmente, se presentan resultados experimentales preliminares que reproducen bien las predicciones teóricas, demostrando la potencialidad didáctica del modelo propuesto como herramienta útil para comprender la compleja física de los vórtices tipo pancake.

ABSTRACT

We develop and study a magnet-based, macroscopic model that makes easier the understanding of some properties of pancake vortices in high temperature superconductors. Although the nature itself of the inter-magnet interactions is quite different from that of the inter-vortex interactions, our calculations show that the energy-dependence on certain geometrical parameters is amazingly similar in both systems, at least qualitatively. Finally, we report preliminary experimental results that reproduce well theoretical predictions, underlining the didactic potential of the proposed model as a useful tool to understand the complex physics of pancake vortices.

I. INTRODUCCIÓN

La modelación de fenómenos microscópicos a escala macroscópica ha sido, desde siempre, uno de los pilares de la Enseñanza de la Física. Bolitas que saltan dentro de una caja de plástico vibrante intentan hacernos visualizar el por qué de la distribución de Boltzmann en un gas, mientras que balines metálicos sometidos a microondas nos permiten comprender claramente cómo un cristal produce un difractograma de rayos X. Un fenómeno microscópico bien explotado en cuando a modelación macroscópica se refiere, es el de la Superconductividad. Los tópicos a modelar han barrido, desde las junturas de Josephson [1] hasta la dinámica de vórtices [2,3].

Uno de los fenómenos más interesantes que ocurren en los superconductores consiste en la aparición de vórtices si existe un campo magnético externo suficientemente fuerte. Dichos vórtices normalmente tienen forma cilíndrica, presentan un núcleo no-superconductor que se extiende una distancia “ ξ ” llamada *longitud de coherencia* a partir de la cual aparecen corrientes superconductoras, cuya densidad decae dentro de una distancia característica “ λ ” llamada *profundidad de penetración* (o *longitud de penetración de London*). En los superconductores de alta temperatura crítica (SAT), específicamente en aquellos que presentan una alta anisotropía (asociada a su estructura “a capas”), estos “cilindros” se dividen formando anillos circulares o corrientes en forma de disco denominados vórtices

tipo “pancake”, los cuales yacen uno en cada capa del material. Estos vórtices bidimensionales situados en diferentes planos superconductores interactúan entre sí a través de dos mecanismos: el efecto Josephson, y la simple interacción magnetostática entre los vórtices [4]. De ahora en adelante, nos referiremos a la región de campos y temperaturas donde sólo este último tipo de interacción es relevante.

En 1996, Benkraouda y Clem [5] realizaron un análisis interesante acerca de cierto fenómeno que ocurre en los vórtices de pancake para materiales de alta anisotropía, donde el acople por interacción de Josephson es muy débil, y el “pinning” debido a los defectos del material es despreciable. En este artículo ellos analizan qué ocurre con una línea de vórtices tipo pancake cuando el campo magnético aplicado se inclina cierto ángulo respecto al eje z perpendicular a los planos en los que se sitúan los vórtices. Los resultados de este artículo (completamente teórico) nos motivaron a estudiar un análogo macroscópico utilizando imanes, con el propósito de establecer una comparación entre los parámetros de uno y otro sistemas.

En este trabajo mostraremos sucintamente, en una primera parte, los resultados obtenidos por Benkraouda y Clem, en su artículo de 1996. Luego, mostraremos los resultados obtenidos por nosotros para el caso de arreglos de imanes, y posteriormente estableceremos comparaciones cualitativas entre la

física de ambos sistemas, para finalmente evaluar la utilidad didáctica del modelo a base de imanes.

II. EL CASO DE LOS VÓRTICES DE PANCAKE

La estructura analizada en la referencia [5] consiste en una línea de vórtices pancake, separados por una distancia s que ha sido inclinada determinado ángulo θ a partir del eje z (ver Figura 1a):

La fuerza con que interactúan diferentes vórtices está dada por [6]:

$$F = -\left(\frac{\phi_0}{4\pi\lambda}\right)^2 \frac{s^2}{\lambda\rho} \left(e^{-s|z_n|/2\lambda^2} - e^{-s r_n/2\lambda^2} \right), \quad (1)$$

donde ϕ_0 es el cuanto de flujo, λ es la profundidad de penetración, $z_n = ns$ ($n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$), $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$

y $r_n = \sqrt{\rho^2 + z_n^2}$ (nótese que todas las fórmulas extraídas de las referencias [5] y [6] han sido llevadas al sistema internacional de unidades). De aquí se observa que si dos vórtices están en el mismo plano se repelen, mientras que si se encuentran en diferentes planos, se atraen. Conocida la fuerza que actúa entre los vórtices, puede calcularse la energía de interacción para cualquier configuración. Por ejemplo, la energía por unidad de longitud de un conjunto alineado de vórtices de pancake inclinado un ángulo θ respecto al eje z es [5]:

$$\varepsilon(\theta) = -\left(\frac{\phi_0}{4\pi\lambda}\right)^2 \ln\left(\frac{\lambda}{\xi} \frac{1 + \cos\theta}{2\cos\theta}\right) \cos\theta. \quad (2)$$

El signo menos indica el hecho de que la energía es de atracción. Entre los resultados que se exponen en la referencia [5] se muestra que, con esta configuración de energía, por encima de determinado ángulo, el sistema se vuelve inestable. Por este motivo los autores sugieren una nueva configuración posible para el grupo de vórtices, que presenta una menor energía libre. Dicha configuración se muestra en la Figura 1b. En la figura L_0 es la altura de la configuración y $\rho = L_0 \tan\theta$. Esta estructura será llamada "estructura de kink", siguiendo el nombre en inglés que los autores utilizan. Llamaremos también "energía de kink" o "energía de tilt", según el caso, a los valores de las respectivas energías. Los cálculos arrojaron que la energía necesaria para deformar una línea recta de vórtices de tipo pancake en una estructura de kink es la siguiente:

$$E_{\text{kink}} = \left(\frac{\phi_0}{4\pi s}\right)^2 \lambda \left[\left(e^{\frac{-\rho}{\lambda}} - 1 \right) + \ln\left(\frac{\rho}{\lambda}\right) - E_i\left(\frac{-\rho}{\lambda}\right) + C \right], \quad (3)$$

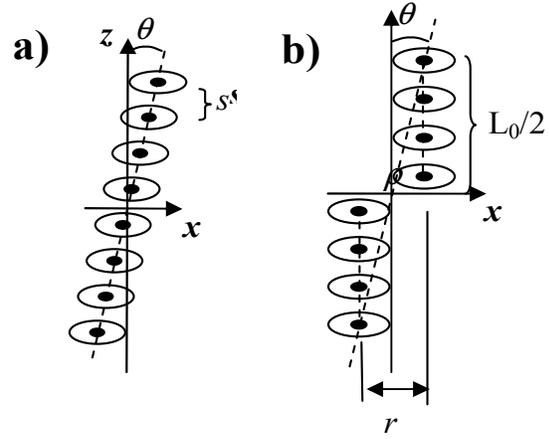


Figura 1. Estructuras de vórtices de pancake.

- Una línea de vórtices tipo pancake inclinada un ángulo θ . (Estructura de "tilt")
- La estructura de "kink" con L_0 como altura de la configuración y $\rho = L_0 \tan\theta$.

donde E_i es la función exponencial-integral y C es la constante de Euler, $C = 0.577\dots$

Por otro lado, de la ecuación (2) se obtiene que la energía requerida para inclinar una línea recta de vórtices de tipo pancake de altura L_0 hasta formar una "estructura de tilt" es la siguiente:

$$E_{\text{tilt}} = \left(\frac{\phi_0}{4\pi s}\right)^2 L_0 \ln\left(\frac{1 + \cos\theta}{2\cos\theta}\right). \quad (4)$$

De las dos ecuaciones anteriores se deduce que, para ángulos no demasiado pequeños y un número suficientemente grande de vórtices tipo pancake, se requiere menos energía para formar la estructura de kink que la que se requiere para formar la estructura de tilt con el mismo ángulo θ [5].

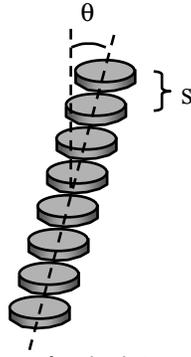
III. ESTRUCTURAS DE TILT Y DE KINK CON IMANES

Con el propósito de simular lo más posible las condiciones descritas anteriormente para el caso de los vórtices, se confinaron los imanes a moverse por "celdas" o "pistas" espaciadas a una distancia s . Consideraremos que los imanes están lo suficientemente distantes como para que puedan considerarse como dipolos magnéticos de momento m . La estructura analizada para los imanes se muestra en la Figura 2. Se conoce que el campo magnético producido por un dipolo está dado por:

$\vec{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \left(\frac{3(\vec{m} \cdot \vec{r})\vec{r}}{r^5} - \frac{\vec{m}}{r^3} \right)$, de donde la energía de interacción entre dos dipolos vecinos, que se calcula mediante la fórmula $E = -\vec{m} \cdot \vec{B}$ es:

$$E_0 = -\frac{\mu_0 m^2}{4\pi s^3} (3\cos^2\theta - 1)\cos^3\theta. \quad (5)$$

Figura 2. Arreglo de imanes alineados e inclinados determinado ángulo θ .



Entonces, se tiene que la energía de interacción por unidad de longitud para un arreglo de N imanes está dada por:

$$E_N(\theta) = - \frac{\mu_0 m^2}{4\pi s^4} \frac{(3 \cos^2 \theta - 1) \cos^4 \theta}{N-1} \sum_{i=1}^{N-1} \frac{N-i}{i^3}. \quad (6)$$

Esta fórmula fue obtenida utilizando el hecho de que hay $N - i$, i -ésimos vecinos cuya distancia respectiva entre ellos es $z_i = i \cdot s$. Como se observa, esta energía es de atracción para ángulos no muy grandes y tiende a cero a medida que el ángulo se aproxima a 90 grados, lo que equivale a que los imanes se encuentren infinitamente alejados. Por otra parte, con el propósito de determinar si la estructura de kink propuesta en [5] es la más favorable energéticamente, se determinó la energía de interacción para diferentes configuraciones de kink que se muestran en la Figura 3. La fórmula general para una estructura que presenta n imanes separados por cada lado, es:

$$E_{\text{kink}}(\theta, n) = - \frac{\mu_0 m^2}{4\pi s^3} \left[4 \sum_{i=1}^{n-1} \frac{n-i}{i^3} + 2 \sum_{i=1}^{N-2n-1} \frac{N-2n-i}{i^3} + 2 \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^{N-2n} \frac{2(n+j-i)^2 - \frac{(N-1)^2}{4} \tan^2 \theta}{\left[(n+j-i)^2 + \frac{(N-1)^2}{4} \tan^2 \theta \right]^{\frac{5}{2}}} + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \frac{2(N-n+j-i)^2 - (N-1)^2 \tan^2 \theta}{\left[(N-n+j-i)^2 + (N-1)^2 \tan^2 \theta \right]^{\frac{5}{2}}} \right]. \quad (7)$$

En nuestro caso se trabajó con diez imanes, por lo que aparecieron cinco configuraciones posibles, escogidas sobre la base de que no existe razón física alguna para esperar una ruptura espontánea de simetría. Las energías de las configuraciones K2, K3 y K4 se obtienen de la ecuación (7) haciendo $N = 10$ y $n = 2, 3$ y 4 respectivamente. Para la configuración K1 hay que anular el primer término dentro del paréntesis y para la configuración K5 se anulan los términos segundo y tercero. Por otro lado, utilizando la fórmula (6) se determinó la energía de

interacción que aparece en la estructura de tilt que se muestra en la Figura 2, donde se obtiene:

$$E_{\text{tilt}}(\theta) = - \frac{\mu_0 m^2}{4\pi s^3} (3 \cos^2 \theta - 1) \cos^3 \theta \sum_{i=1}^{10-1} \frac{10-i}{i^3}. \quad (8)$$

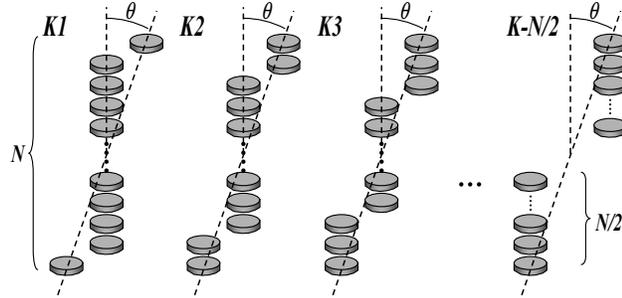


Figura 3. Algunas configuraciones consistentes en un número $N-2n$ de imanes alineados en el centro, con un número n de imanes separados de dicha estructura central, a cada lado.

La Figura 4 muestra una gráfica que compara las energías de la configuración de tilt (T) con cada una de las configuraciones (K_i). De la gráfica se observa que efectivamente de todas las configuraciones K_i aquella que presenta menor energía es la configuración K5, lo cual está de acuerdo con la proposición hecha en [5]. De la gráfica también puede observarse que para determinados ángulos las configuraciones de kink se vuelven más estables que la de tilt ya que presentan menor energía. Es curioso observar como las configuraciones K1, K2, K3 y K4 presentan una energía bastante similar cuyo valor aumenta a medida que aumenta el número de la configuración, sin embargo la configuración K5 presenta una abrupta caída de energía respecto a las configuraciones anteriores.

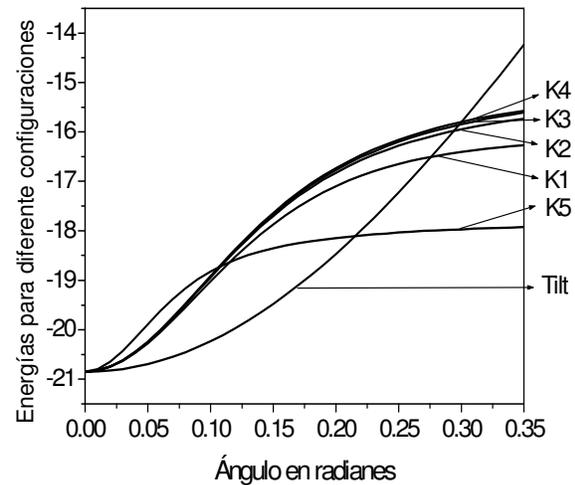


Figura 4. Gráficas de energía para diferentes configuraciones mostradas en la Figura 3.

IV. COMPARACIÓN ENTRE VÓRTICES E IMANES

Antes que nada es necesario hacer notar que las fuerzas de interacción entre los vórtices y entre los imanes, a pesar de ser ambas de origen magnético, presentan notables diferencias, asociadas a la forma en que decaen en el espacio los campos magnéticos asociados a vórtices y a imanes, respectivamente. Sin embargo en nuestro trabajo hemos mostrado como existen concordancias cualitativas entre ambos modelos en determinados aspectos. Como se mostró en la sección II, la energía de tilt por unidad de longitud de una línea de vórtices de pancake es:

$$\epsilon_v(\theta) = \left(\frac{\phi_0}{4\pi\lambda} \right)^2 \ln \left(\frac{\lambda}{\xi} \frac{1 + \cos\theta}{2\cos\theta} \right) \cos\theta, \quad (9)$$

mientras que para los imanes:

$$\epsilon_i(\theta) = \left(\frac{\mu_0 m^2}{4\pi s^2} \right) \frac{(3\cos^2\theta - 1)\cos^4\theta}{9} \sum_{i=1}^9 \frac{10-i}{i^3}. \quad (10)$$

Ambos valores de energía se graficaron como se muestra en la Figura 5. En la gráfica hay que tener en cuenta que ésta se ajustó con determinado factor de escala. Aunque en esencia la forma de las gráficas es diferente, su comportamiento cualitativo es similar. Ambas comienzan con determinado valor de energía cuyo módulo decae a cero cuando el ángulo se aproxima a 90 grados. Es necesario hacer notar que para el caso de los vórtices, la gráfica se mantiene todo el tiempo por debajo del eje de los ángulos, lo cual ratifica el hecho de que los vórtices siempre que se encuentren en diferentes planos van a atraerse. Para el caso de los imanes esto no es así, sino que existe un ángulo para el cual las fuerzas entre imanes se tornan de repulsión. Otro aspecto a señalar es el hecho de que en el caso de los imanes la energía descende asintóticamente a cero, mientras que para los vórtices esto no es así.

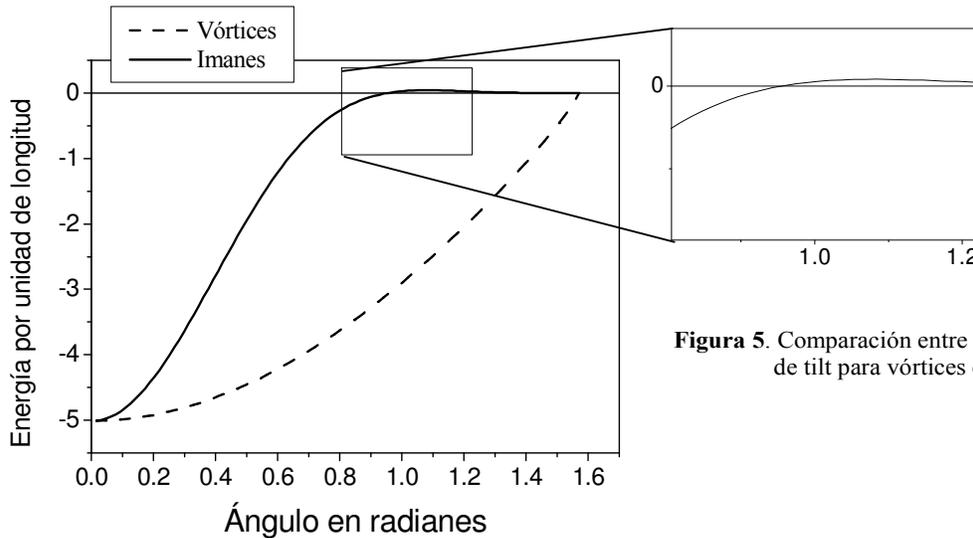


Figura 5. Comparación entre las energías de tilt para vórtices e imanes.

Por último, queremos mostrar una comparación en cuanto a un hecho que ya se señaló anteriormente: para determinado ángulo, la estructura de kink K5 se vuelve más estable que la de tilt. Debido a esto se decidió graficar la diferencia entre la energía de tilt y la energía de kink para ambos casos en la Figura 6. Como se muestra en la gráfica, existe determinado ángulo a partir del cual la energía de kink se hace menor que la de tilt, lo que dice que es energéticamente más favorable esta configuración. Se puede apreciar que la forma de las gráficas es bastante parecida: ambas parten de cero y crecen a medida que aumenta el ángulo para valores no demasiado grandes de éste.

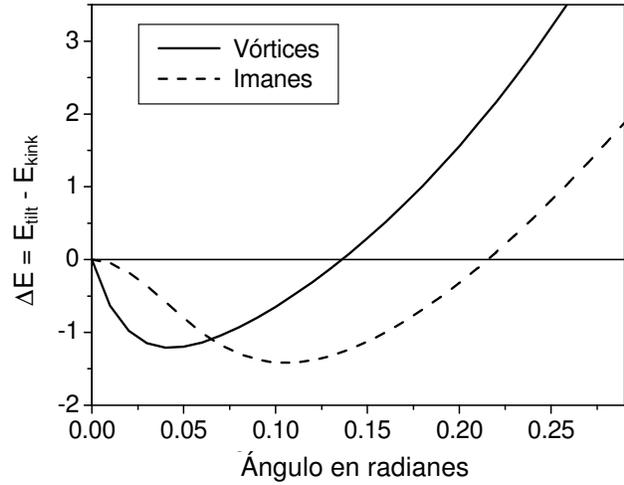


Figura 6. Comparación entre energías de kink y de tilt para vórtices y para imanes.

V. UN EXPERIMENTO PRELIMINAR

Luego de analizado todo lo expuesto anteriormente, decidimos comprobar en la práctica algunos resultados. Para ello hicimos un experimento sencillo con solamente seis imanes, utilizando un montaje

consistente en seis “celdas” o “rampas” de vidrio equidistantes, dentro de las cuales cada imán podía deslizarse con poca fricción. Para minimizar la fricción (recuérdese que todos los cálculos teóricos en la referencia [5] y realizados por nosotros tienen lugar en un ambiente idealizado de cero “pinning”, equivalente a cero fricción) se aplicaron vibraciones moderadas a las celdas. El experimento consistió en colocar inicialmente los seis imanes formando una línea recta perpendicular a las celdas, e ir aplicando una fuerza sobre los imanes de los extremos de tal suerte que la línea fuera inclinándose, tal y como se espera de la estructura de “tilt”. A partir de cierto ángulo, se debía esperar una transición hacia una estructura de “kink”. La teoría predice que la estructura más estable que debe tomar la configuración luego de cierto ángulo sería en este caso la K3, correspondiente a la ruptura en dos partes iguales para el caso de seis imanes. Nuestros resultados arrojaron que en el 87% de un total de 30 repeticiones del experimento esta fue la estructura alcanzada. Además, los cálculos muestran que el ángulo para el cual debe romperse la estructura de tilt y formarse la de kink para seis imanes es $\theta_{teo} = 16.4^\circ$, el obtenido por nosotros experimentalmente fue de $\theta^{exp} = 18.7^\circ \pm 2.2^\circ$, (para el cálculo de errores se tuvo en cuenta la desviación cuadrática media de los valores de longitud medidos, además de los errores instrumentales correspondientes), lo cual muestra una magnífica concordancia con los resultados teóricos obtenidos.

VI. CONCLUSIONES

Hemos propuesto un modelo macroscópico basado en arreglos de imanes permanentes que puede contribuir a comprender la física involucrada en los vórtices tipo “pancake” cuando se desprecian las interacciones entre pancakes mediadas por efecto Josephson, así como el “pinning” producido por los defectos del material superconductor. El comportamiento de la energía calculada para nuestros arreglos de imanes se parece cualitativamente al correspondiente a vórtices de pancake. En especial, nuestro modelo reproduce la transición de la configuración de “tilt” hacia la configuración de “kink” en la medida que se aplica una fuerza de cizalladura sobre los vórtices (ó los imanes). Experimentos preliminares con imanes también permiten visualizar esta transición, cuya semejanza semi-cuantitativa con los cálculos es notable. Estos resultados indican que nuestro modelo macroscópico puede ser de gran ayuda para obtener una representación intuitiva de la muy compleja física de los vórtices tipo pancake.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen a J. R. Clem por sus consejos y por proveer parte de la literatura necesaria, así como a R. Mulet por discusiones científicas. También al laboratorio de Ingeniería de Zeolitas por prestarnos un vibrador para los experimentos.

REFERENCIAS

- [1] ALTSHULER, E. and R. GARCÍA (2003): **Am. J. Phys.** 71, 405.
- [2] ALTSHULER, E. (2000): In **Some contemporary problems of condensed matter physics** (Nova Science Publishers, 2000), 65-127.
- [3] ALTSHULER, E. and T.H. JOHANSEN (2004): **Rev. Mod. Phys.** 76, 471.
- [4] BLATTER, G. *et al.* (1994): **Rev. Mod. Phys.** 66, 1125.
- [5] BENKRAOUDA and J.R. CLEM (1996): **Phys. Rev. B** 53, 1.
- [6] CLEM, J. R. (1991): **Phys. Rev. B** 43, 10.

ELECTROMAGNETIC ANALOGUE OF A POINT STRUCTURAL PARTICLE

Ll. Uranga¹, M. Y. Ballester A. Martínez and E. Entralgo[†]

Instituto Superior de Tecnología y Ciencia Aplicadas (INSTEC), La Habana, Cuba

ABSTRACT

Starting with the canonical equations of a electromagnetic field and its equivalence with a system of oscillators the fields corresponding to an isolated point structural particle (p.s.p.) and in presence of stationary and homogeneous electric and magnetic fields are obtained. It is showed that the state of the p.s.p. can be obtained through its electromagnetic analogue, neglecting the terms of the subparticles radiation losses.

RESUMEN

En este trabajo, a partir de la equivalencia entre las ecuaciones canónicas del campo electromagnético y un sistema de osciladores, se obtienen los campos electromagnéticos equivalentes a una partícula estructural puntual (p.s.p.) aislada y en presencia de campos eléctricos y magnéticos homogéneos y estacionarios. Se demuestra que el estado de la p.s.p. puede ser representado por su análogo electromagnético si se desprecian los términos que expresan las pérdidas por radiación de las subpartículas.

I. INTRODUCTION

Since the early studies of Schrödinger [1] on building a classical theory of a particle with spin, a lot of work has been carried out in order to develop models and to analyze physical implications of such particle. The main difficulty of the large number of theoretical studies devoted to this matter [2] is that the notion of spin is introduced in mathematical formalisms together with other hidden variables which have no explicit physical meaning. Besides, in the models mentioned in [2], either the particles are not point objects or the theory can be called classical only formally. In the papers [2-5] the theory of the point structural particle (p.s.p.) was developed, that is, a classical theory for a point particle with spin and other variables that have a clear physical meaning.

The straightforward derivation of a relativistic model of a p.s.p. is difficult since it involves relativistic equations of motion of a many particle system. The aim of this work is to present an alternative approach based on the equivalence of a p.s.p. and an electromagnetic field. It allows to use the intrinsic invariance of the electromagnetic field under Lorentz transformations. To this purpose an isolated p.s.p. and an uncharged p.s.p. in presence of homogeneous and stationary electric and magnetic fields are analyzed.

The organization of the paper is the following. In Section II we briefly describe the model of the point structural particle and the general procedure. In Section III the results are presented and discussed. Finally, in Section IV some conclusions are drawn.

II. THE MODEL

A p.s.p. is a cluster of point subparticles of masses m_j , charges e_j , coordinates q_j and velocities dq_j/dt . Due to their interaction they remain confined in small region of space

$$|q_j(t) - q_k(t)| \leq l_0 \quad (1)$$

for arbitrary values of k, j and t .

Such condition leads to describe the p.s.p. through magnitudes that characterize it as a whole: the total mass m , the charge e , center of mass coordinate q and momentum p , besides, total angular momentum J and total energy E . Time evolution of this quantities is determined by an infinite set of coupled differential equations. This equations system is truncated using the small parameters l_0 and

$$Z_j = \frac{e_j}{m_j} - \frac{e}{m} \quad (2)$$

Then, a closed system of equations for the 15 independent variables is obtained [4,6-8]:

$$P = m\dot{q} + \frac{(g - g_0)}{c} S \times E + \frac{2g(g - g_0)}{K} (d\nabla) S \times E,$$

$$\dot{d} = F,$$

E-mail: ¹llinersy@info.isctn.edu.cu

$$\dot{\mathbf{F}} = -\omega_0^2 \mathbf{d} + \kappa \mathbf{E} + (\mathbf{d}\nabla) \left(\mathbf{G} + \frac{\mathbf{e}}{m} \mathbf{E} \right) + \left(\frac{\kappa}{mc} \mathbf{P} + \frac{\mathbf{e}}{mc} \mathbf{F} \right) \times$$

$$\times \mathbf{H} + \frac{\mathbf{e}}{m^2 c} \mathbf{P} \times (\mathbf{d}\nabla) \mathbf{H} + \frac{2g(g-g_0)}{m} \nabla \mathbf{S} \cdot \mathbf{E} \times \mathbf{P},$$

$$\dot{\mathbf{P}} = m\mathbf{G} + e\mathbf{E} + \frac{\mathbf{e}}{mc} \mathbf{P} \times \mathbf{H} + (\mathbf{d}\nabla)^2 \left[\mathbf{G} + \frac{\mathbf{e}}{m} \mathbf{E} \right] +$$

$$+ g\nabla(\mathbf{S}\mathbf{H}) + \frac{2c}{\kappa} g(g-g_0)(\mathbf{d}\nabla)\nabla(\mathbf{S}\mathbf{H}) + \frac{1}{c} \cdot$$

$$\cdot \left\{ \left(\frac{\mathbf{P}}{m} + \frac{\mathbf{e}}{m\kappa} \mathbf{F} \right) \times (\mathbf{d}\nabla) \mathbf{H} + \frac{\mathbf{e}}{2m^2 \kappa} \mathbf{P} \times (\mathbf{d}\nabla)^2 \mathbf{H} \right\} +$$

$$+ \frac{2g(g-g_0)}{m\kappa} \nabla(\mathbf{d}\nabla) \mathbf{S} \cdot \mathbf{E} \times \mathbf{P},$$

$$\dot{\mathbf{S}} = \mathbf{S} \times \left\{ g\mathbf{H} + \frac{2c}{\kappa} g(g-g_0)(\mathbf{d}\nabla) \mathbf{H} \right\} + (g-g_0) \cdot$$

(3)

$$\cdot \left\{ \frac{1}{mc} \mathbf{S} \times \mathbf{E} \times \mathbf{P} + \frac{2g}{m\kappa} (\mathbf{d}\nabla) \times \mathbf{E} \times \mathbf{P} \right\}$$

with energy

$$E = \frac{F^2}{2\kappa} + \frac{\omega_0^2}{2\kappa} d^2 + W_0 + \frac{P^2}{2m} + m\phi + e\varphi - dE +$$

$$+ \frac{1}{2\kappa} (\mathbf{d}\nabla)^2 \left(\phi + \frac{e}{m} \varphi \right) - g\mathbf{S}\mathbf{H} - \frac{(g-g_0)}{mc} \mathbf{S} \cdot \mathbf{P} \times \mathbf{E} -$$

$$- \frac{2g(g-g_0)}{m\kappa} (\mathbf{d}\nabla) (\mathbf{S} \cdot \mathbf{P} \times \mathbf{E})$$

where $\phi(r), \varphi(r), A(r)$ are the potentials of the external gravitational, electric and magnetic fields and \mathbf{G}, \mathbf{E} and \mathbf{H} are their respective intensities.

Although the relativistic invariance of electromagnetic fields is restricted to those ones which obey Lorentz gauge, as a first approach we employ Coulomb gauge. Using a convenient normalization canonical equations of such field become equivalent to a system of harmonic oscillators [9]. We use the inverse procedure to assign to each system its corresponding field.

III. RESULTS AND DISCUSSION

A. Isolated p.s.p.

The energy of an isolated p.s.p. is:

$$E = \frac{F^2}{2\kappa} + \frac{\omega_0^2}{2\kappa} d^2 + \frac{P^2}{2m} \quad (5)$$

being ω_0 the proper frequency.

We propose an electromagnetic field that satisfies both Maxwell equations and Coulomb gauge.

$$\mathbf{A} = C \left[-f \cos(\kappa r) + \omega_0 d \sin(\kappa r) \right] \quad (6)$$

If we choose

$$C = \sqrt{\frac{4\pi}{L^3}} \frac{1}{k_0 \sqrt{\kappa}} \quad (7)$$

the energy of the field will be equal to the internal energy of the p.s.p.

B. Uncharged p.s.p. in presence of homogeneous and stationary electric and magnetic fields

For an uncharged p.s.p. in an homogeneous electric field we obtain:

$$\dot{\mathbf{f}} = -\omega_0^2 \mathbf{d} + \kappa \mathbf{E} \quad (8)$$

and with the electromagnetic field

$$\mathbf{A} = \sqrt{\frac{4\pi}{L^3}} \frac{1}{k\sqrt{\kappa}} \left[-f \cos(\kappa r) + \omega_0 \left(d - \frac{\kappa \mathbf{E}}{\omega_0^2} \right) \sin(\kappa r) \right] \quad (9)$$

the energy inside the normalization box is

$$E = \frac{\omega_0^2 d^2}{2\kappa} + \frac{f^2}{2\kappa} - E d + \frac{\kappa E^2}{2\omega_0^2} \quad (10)$$

It is the same that the internal energy of the particle [10] except for the last term. This term is proportional to the charge of the subparticles and the electric field intensity. It is related to radiation losses of the subparticles [9], which is implicitly included in the Maxwell equations and its not considered in the model of the p.s.p.

In the case of an uncharged p.s.p. in an homogeneous magnetic field the relevant equations of motion of the internal degrees of freedom are:

$$\begin{aligned} \ddot{f}_{\parallel} &= \omega_0^2 f_{\parallel} \\ \ddot{f}_{\perp} &= -\omega_1^2 f_{\perp} \\ \ddot{x} &= -\omega_2^2 x \end{aligned} \quad (11)$$

where

$$x = -\omega_0 \kappa \frac{\sqrt{2gSH}}{gH} S_{\perp} \quad (12)$$

f_{\parallel} and f_{\perp} are respectively the components of the dipolar velocity parallel and perpendicular to the spin axis.

$$\begin{aligned} \omega_1^2 &= \omega_0^2 - \frac{\kappa H^2}{m_c^2}, \\ \omega_2^2 &= g^2 H^2 \end{aligned} \quad (13)$$

Following the same procedure we choose

$$\begin{aligned} A = \sqrt{\frac{4\pi}{L^3}} \frac{1}{k_0 \sqrt{\kappa}} = & \left\{ -f_0 \cos(k_0 r) + \frac{1}{\omega_0} \dot{f}_0 \sin(k_0 r) - \right. \\ & - f_1 \cos(k_1 r) + \frac{1}{\omega_1} \dot{f}_1 \sin(k_1 r) - x \cos(k_2 r) + \\ & \left. \frac{1}{\omega_2} \dot{x} \sin(k_2 r) \right\} \end{aligned} \quad (14)$$

yielding an energy

$$E = \frac{w_0^2 d^2}{2\kappa} + \frac{f^2}{2\kappa} - gSH - \frac{(f \times H)^2}{2mc^2 \omega_0^2} + \frac{(p \times H)^2}{2mc^2 \omega_0^2} + \frac{p(d \times H)}{mc} \quad (15)$$

The first three terms represent the internal energy of the p.s.p. [10] while the later ones have the same radiation origin that in the case of homogeneous electric field.

IV. CONCLUSIONS

In this paper we proposed classical electromagnetic fields which are equivalent to an isolated p.s.p. and a p.s.p. in presence of homogeneous and stationary electric and magnetic external fields. This allows to obtain the equations of motion of a p.s.p. from that ones of the analogue system and represents a first step towards the building of a relativistic model of a classical particle with spin.

REFERENCES

- [1] SCHRÖDINGER, E. (1930): **Sitzungber. Preuss. Acad. Wiss Phys.-Math Kl.**, 24 418.
- [2] ENTRALGO, E. and V.V. KURYSHKIN (1990): **Il Nuovo Cimento** 103A, 4.
- [3] RODRÍGUEZ, R.; A. DÍAZ; E. ENTRALGO and F. GUZMÁN (1996): **Rev. Mex. Fís.** 42(3).
- [4] BALLESTER, M.Y. (2000): Master Thesis, ISCTN, Havana.
- [5] URANGA, LI. and M.Y. BALLESTER (2003): **Proceedings of IV Int. Symp. on Nucl. and related techniques**, Havana.
- [6] MOLLER, C. (1952): **The theory of relativity**, Oxford University Press.
- [7] CORBEN, H.C. and P. SEHTLE (1960): **Classical mechanics**, 2nd ed., Wiley, New York.
- [8] DURBIN, S.M. (1998): **Phys. Rev. B** 57(13).
- [9] JACKSON, J.D. (1996): **Electrodinámica clásica**, Ed. Alhambra, S. A. Madrid.
- [10] RODRÍGUEZ, R. (1996): Master Thesis, ISCTN, Havana.

TRANSFER MATRICES AND GREEN FUNCTIONS FOR THE STUDY OF ELEMENTARY EXCITATIONS IN MULTILAYERED HETEROSTRUCTURES

R. Pérez Álvarez¹ and F. García Moliner
Universidad "Jaume I", Castellón de la Plana, Spain

ABSTRACT

This article is concerned with a mathematical tool, the Associated Transfer Matrix \mathbf{T} , which proves useful in the study of a wide class of physical problems involving multilayer heterostructures. General properties of linear, second order differential matrix Sturm Liouville operators are discussed as a basis for establishing general properties of \mathbf{T} , which is also generally related to the Green function \mathbf{G} . Some identities satisfied by \mathbf{T} are derived, which prove useful in practice to monitor the numerical quality of computational processes.

Key words: Transfer Matrix, Green function, heterostructure.

PACS: 02.90.+p; 62.30.+d; 68.35.Ja; 68.65.Ac; 73.21.Ac; 73.21.-b.

RESUMEN

Este artículo trata de una herramienta matemática, la Matriz de Transferencia Asociada \mathbf{T} , la cual resulta de utilidad en el estudio de una clase amplia de problemas físicos que involucran heteroestructuras multicapas. Se discuten propiedades generales de los operadores diferenciales lineales, de segundo orden matriciales de Sturm-Liouville como base para establecer las propiedades generales de \mathbf{T} , que también se relaciona de manera general con la Función de Green \mathbf{G} . Se derivan ciertas identidades satisfechas por \mathbf{T} que demuestran ser útiles en la práctica para supervisar la calidad numérica de procesos computacionales.

Palabras clave: Matriz de Transferencia, Función de Green, heteroestructura.

I. INTRODUCTION

Problems concerned with multilayer systems arise very often in different fields of physics. One has to integrate differential equations across some sequence of different domains, which raises the question of repeated matching at all interfaces involved. In particular, the development of efficient techniques of epitaxial crystal growth originated a great deal of work of this nature in solid state physics, notably -but not only- in the field of semiconductor quantum heterostructures^{1,2}.

A great deal of activity has also been concerned with *Quasiregular Heterostructures*³ which follow some non periodic self-replicative sequence, of which the best known is the *Fibonacci sequence*⁴. In these cases the number of interfaces can be very large.

It is therefore of practical value to have mathematical tools available which can be useful in the study of such systems. Among these, the Surface Green Function Matching¹ has been extended to an arbitrarily large number of interfaces⁵. Green functions were generally related to a transfer matrix⁶ which transfers amplitudes and normal derivatives

-of which more will be said presently- but it was found later^{7,8} that it is physically more appealing to introduce a different kind of transfer matrix, here denoted \mathbf{T} and termed the *Associated Transfer Matrix* which is even simpler to operate with and is directly related to the physically interesting magnitudes of the problem under study.

The purpose of this article is to expound on the general relationship between \mathbf{T} and the Green function \mathbf{G} , to discuss some basic formal properties of \mathbf{T} and to derive from this some general identities satisfied by \mathbf{T} which can prove useful in practice. We shall deal explicitly with the case of planar geometry, although the analysis can also be adapted to other tractable geometries -e.g. spherical or cylindrical.

Irrespective of the specific physical nature of the states, modes, waves or quasiparticles we may be concerned with, the general setup is the following. We start from 3D linear, second order differential system and Fourier transform in the 2D (x,y) plane of the interfaces, thus introducing a 2D wavevector κ . We then have a system of N coupled, κ -dependent ordinary differential equations in the variable z, in the

E-mail: ¹rpa@fisica.uh.cu

Permanent address: Dpto. Física Teórica, Facultad de Física, Universidad de La Habana.

direction perpendicular to the interfaces. We stress that in practice N can be sufficiently large that an analytical study is impracticable. For instance, in electronic band structure calculations one can find multiband envelope function calculations of electronic band structure with $N = 8^9$ and $N = 14^{10}$ and pseudo-potential calculations with up to $N = 65^{11}$. Thus, it is interesting to study in some detail the formal properties of an object, \mathbf{T}^7 , which is a useful tool for numerical computation.

The general formulation of the problem is setup in Section 2 and basic questions related to the hermiticity of linear, second order matrix differential Sturm-Liouville operators are discussed in Section 3. This provides a basis to study infinite domains and regularity at infinity –Section 4- after which the general relationship between \mathbf{T} and the Green function \mathbf{G} is established in Section 5. Finally, general properties and identities satisfied by \mathbf{T} are derived in Section 6.

II. FORMULATION OF THE PROBLEM

The N coupled differential equations involve N coupled amplitudes corresponding to the physical model under study -e.g. the components of an electronic wavefunction in an N -band envelope function model or coupled elastic vibration amplitudes and electrostatic potential in piezoelectric waves. Loosely speaking, we shall refer to the 'primary field', for reasons presently explained.

The N amplitudes of the primary field will be condensed in an object, $\mathbf{F}(z)$, denoted for convenience as 'N-vector', which need not imply that it transforms literally as a vector.

We now consider the vast class of physical problems for which the differential system can be cast in a compact matrix form as

$$\mathbf{L}(z) \cdot \mathbf{F}(z) = \frac{d\mathbf{A}(z)}{dz} + \mathbf{Y}(z) \cdot \frac{d\mathbf{F}(z)}{dz} + \mathbf{W}(z) \cdot \mathbf{F}(z) = 0, \quad (1)$$

where we have defined another N -vector, namely

$$\mathbf{A}(z) = \mathbf{B}(z) \cdot \frac{d\mathbf{F}(z)}{dz} + \mathbf{P}(z) \cdot \mathbf{F}(z). \quad (2)$$

We denote this linear differential form, derived from \mathbf{F} , as the *secondary field*. For instance, if \mathbf{F} describes elastic strains, then \mathbf{A} describes stresses. More precisely, normal stress components¹. Furthermore, we are concerned with eigenvalue problems. The eigenvalue parameter, henceforth denoted Ω , is contained in \mathbf{W} . The dependence on κ and Ω is understood throughout.

The z dependence of some, or all, of the (matrix) coefficients of (1) and (2) is an essential feature of heterostructures, even if piecewise homogeneous domains are involved.

Now, $\mathbf{F}(z)$ is obviously continuous everywhere and, furthermore, integration across any of the interfaces of the heterostructure proves that $\mathbf{A}(z)$ is also continuous, which bears out the convenience of this compact formulation. Since both, the primary field and the secondary field are continuous, this suggests the convenience of defining, instead of a transfer matrix $\mathbf{M}^{1,6}$ which transfers $\mathbf{F}(z)$ and $\mathbf{F}'(z)$, a different one, here denoted as the Associated Transfer Matrix (ATM) \mathbf{T} , which transfers the two fields that are continuous everywhere. Thus we define the $2N$ – vector

$$\Psi(z) = \begin{pmatrix} \mathbf{F}(z) \\ \mathbf{A}(z) \end{pmatrix} \quad (3)$$

and then, starting from any initial point z_0 , we define $\mathbf{T}(z, z_0)$ which transfers Ψ from z_0 to any z by

$$\Psi(z) = \mathbf{T}(z, z_0) \cdot \Psi(z_0) \quad (4)$$

Unlike the *coefficient transfer matrix*, often used for systems with piecewise constant coefficients^{12,13}, $\mathbf{M}(z, z_0)$ and $\mathbf{T}(z, z_0)$ do not depend on knowing a basis of $2N$ linearly independent solutions. Both, $\mathbf{M}(z, z_0)$ and $\mathbf{T}(z, z_0)$, pertain to initial value problems, while the Green function $\mathbf{G}(z, z')$ depends on the choice of boundary conditions. Thus, for a given differential system \mathbf{M} and \mathbf{T} are unique, while \mathbf{G} is not. The relationship between \mathbf{G} and \mathbf{M} was discussed in^{1,6,15}. Here we discuss the relationship between \mathbf{G} and \mathbf{T} , for which we first study the general properties of the latter, for which first some observations concerning the differential system are in order.

III. THE HERMITICITY OF THE DIFFERENTIAL OPERATOR

The differential matrix $\mathbf{L}(z)$ of (1) is the representation of a linear differential operator which we now discuss. We recall¹⁴ that the full definition of the operator requires the specification of the manifold \mathbf{S} of functions –here termed 'vectors' $\mathbf{F}(z)$ - on which it acts.

Let \hat{p} be an operator represented by the operating rule

$$p = -i \frac{d}{dz}. \quad (5)$$

So far, \hat{p} is formally Hermitean¹⁴, [Chapter 3]. Now let \hat{L} , represented by the operating rule (1), be an operator defined to act on a given manifold \mathbf{S} and let \mathbf{F} denote the generic function of this particular manifold. We write the system (1) explicitly as

$$\mathbf{L}(z) \cdot \mathbf{F}(z) = \frac{d}{dz} \left[\mathbf{B}(z) \cdot \frac{d\mathbf{F}(z)}{dz} + \mathbf{P}(z) \cdot \mathbf{F}(z) \right] + \mathbf{Y}(z) \cdot \frac{d\mathbf{F}(z)}{dz} + \mathbf{W}(z) \cdot \mathbf{F}(z). \quad (6)$$

Thus, the operator \hat{L} represented by this equation is

$$\hat{L} = -\hat{p} [\mathbf{B} \cdot \hat{p} + i\mathbf{P}] + i\mathbf{Y} \cdot \hat{p} + \mathbf{W}. \quad (7)$$

where the dots indicate that, as a matrix, this is to act on vectors \mathbf{F} . Furthermore, in most physical problems related to heterostructures the matrix coefficients satisfy the conditions

$$\mathbf{B} = \mathbf{B}^\dagger, \quad \mathbf{P} = -\mathbf{Y}^\dagger, \quad \mathbf{W} = \mathbf{W}^\dagger, \quad (8)$$

Thus, for the large class of problems we are concerned with we assume (8) to hold. Then it is easily seen that the *Hermitean* adjoint of \hat{L} is

$$\hat{L}^\dagger = -\hat{p}^\dagger \mathbf{B}^\dagger \cdot \hat{p}^\dagger + i\hat{p}^\dagger \mathbf{Y}^\dagger \cdot + i\mathbf{P}^\dagger \cdot \hat{p}^\dagger + \mathbf{W}^\dagger, \quad (9)$$

which so far only ensures that \hat{L} is *formally Hermitean*.

We now, more specifically, define \mathbf{S} as the manifold of functions defined in a given interval $[a, b]$ -provisionally assumed to be finite- and satisfying given boundary conditions at its extremes. A physical example could be a quantum well with infinite barriers -vanishing amplitudes- in the external media. Let us then consider another operator \hat{L}_2 , acting on another manifold \mathbf{S}_2 of functions \mathbf{F}_2 defined in the same interval $[a, b]$ but otherwise satisfying so far unspecified boundary conditions.

We define \hat{L}_2 to be represented by

$$\mathbf{L}_2(z) \cdot \mathbf{F}_2(z) = \frac{d}{dz} \left[\mathbf{B}^\dagger(z) \cdot \frac{d\mathbf{F}_2(z)}{dz} - \mathbf{Y}^\dagger(z) \cdot \mathbf{F}_2(z) \right] - \mathbf{P}^\dagger(z) \cdot \frac{d\mathbf{F}_2(z)}{dz} + \mathbf{W}^\dagger(z) \cdot \mathbf{F}_2(z) \quad (10)$$

and then at every point z of the interval $[a, b]$, by assumption common to \mathbf{S} and \mathbf{S}_2 , we define the residual $\mathbf{R}(z)$ by

$$\mathbf{R}(z) = \left[\frac{d\mathbf{F}^\dagger(z)}{dz} \cdot \mathbf{B}^\dagger(z) \cdot \mathbf{F}_2(z) - \mathbf{F}^\dagger(z) \cdot \mathbf{B}^\dagger(z) \cdot \frac{d\mathbf{F}_2(z)}{dz} + \mathbf{F}^\dagger(z) \cdot \mathbf{P}^\dagger(z) \cdot \mathbf{F}_2(z) + \mathbf{F}^\dagger(z) \cdot \mathbf{Y}^\dagger(z) \cdot \mathbf{F}_2(z) \right]^\dagger. \quad (11)$$

We then study the integral

$$\left\langle F_2 | \hat{L} \mathbf{F} \right\rangle = \int_a^b dz \mathbf{F}_2^\dagger(z) \cdot \mathbf{L}(z) \cdot \mathbf{F}(z) \quad (12)$$

which, after partial integration, is

$$\left\langle F_2 | \hat{L} \mathbf{F} \right\rangle = \left\langle F | \hat{L}_2 \mathbf{F}_2 \right\rangle^\dagger + \mathbf{R}(b) - \mathbf{R}(a). \quad (13)$$

Now, since the matrix coefficients satisfy the conditions (8), the operating rule for \hat{L}_2 is the same as for \hat{L} , whence follows that the residual is

$$\mathbf{R}(z) = \mathbf{F}_2^\dagger(z) \cdot \mathbf{A}(z) - \mathbf{A}^\dagger(z) \cdot \mathbf{F}(z) \quad (14)$$

and thus the residual difference appearing in (13) is

$$\mathbf{R}(b) - \mathbf{R}(a) = \mathbf{F}_2^\dagger(b) \cdot \mathbf{A}(b) - \mathbf{A}^\dagger(b) \cdot \mathbf{F}(b) - \mathbf{F}_2^\dagger(a) \cdot \mathbf{A}(a) + \mathbf{A}^\dagger(a) \cdot \mathbf{F}(a). \quad (15)$$

The mathematical definition of \mathbf{R} acquires a physical meaning in terms of the primary and secondary fields, the two objects transferred by \mathbf{T} .

This is the central point of the analysis. The operators \hat{L} and \hat{L}_2 are not yet fully defined, as the boundary conditions have not been specified. If we assume only that \mathbf{S} and \mathbf{S}_2 are such that the combined effect of their boundary conditions is such that $\mathbf{R}(b) - \mathbf{R}(a)$ vanishes, then

$$\left\langle F_2 | \hat{L} \mathbf{F} \right\rangle = \left\langle F | \hat{L}_2 \mathbf{F}_2 \right\rangle^\dagger \quad (16)$$

and \hat{L}_2 is the Hermitean adjoint of \hat{L} .

If, furthermore, the boundary conditions are the same in \mathbf{S} and \mathbf{S}_2 , then \hat{L}_2 -the Hermitean adjoint of \hat{L} - is also equal to \hat{L} and it is then that \hat{L} is really Hermitean, that is to say, technically, it is *totally Hermitean*¹⁴. Such is the case, for instance, for electronic states with external infinite barriers, where all amplitudes vanish, or for elastic waves with external free surfaces, where all normal stresses vanish.

It seems reasonable to put forward this type of analysis to justify the basis of standard calculations for physical models with $N > 1$. Furthermore, this is the starting point to analyze a question directly relevant to the physical models employed in practice to study heterostructure.

IV. INFINITE DOMAINS: CAUSALITY AND REGULARITY AT INFINITY

This situation arises if the external media are semiinfinite or, simply, if one studies a bulk medium. So far it has been implicitly assumed that the eigenvalues are real, which is formally correct if the interval $[a, b]$ is finite. We must now analyse the situation when this is infinite, for which a brief reminder of some basic facts is at this stage convenient. In order to fix ideas it suffices to consider a simple case with $N = 1$.

Firstly, we must define a sign convention for the description of stationary amplitudes $F(z, t)$. We adopt the convention

$$F(z, t) = F_0 e^{i(kz - \omega t)} \quad (17)$$

for a wave travelling to the right. Then, when in the time dependent picture $t \rightarrow \infty$, in the stationary state time independent amplitude,

$$F(z) = F_0 e^{ikz} \quad (18)$$

the variable $z \rightarrow \infty$. In order for this to be a physically acceptable regular solution, it cannot blow up for $z \rightarrow \infty$, which requires formally (i) that the real wave-vector k , corresponding to the allowed eigenvalue of a stationary propagation eigenstate, be defined as

$$k = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (k + i\varepsilon) \quad (19)$$

and (ii) that we define the limit of $F(z)$ for $z \rightarrow \infty$ as the *regular limit*.

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \lim_{z \rightarrow \infty} F_0 e^{i(k+i\varepsilon)z} = 0 \quad (20)$$

The same analysis holds obviously for waves travelling to the left and $z \rightarrow -\infty$ and the same basic facts hold for less simple cases, e.g. for any $N > 1$.

Let us now return to the standard operator $\hat{\mathbf{L}}$ on which the analysis of the class of problems here considered is based. Since this is defined to act on the manifold \mathbf{S} of functions which are regular at infinity, the second and fourth terms of the residual difference (15) vanish. However in order for (15) to vanish entirely, the condition on the adjoint of $\hat{\mathbf{L}}$ is that the boundary conditions of regularity at infinity

must hold for the \mathbf{F}_2^\dagger , not the \mathbf{F}_2 . In fact, in order for (15) to vanish the \mathbf{F}_2 must be precisely irregular at infinity, as only then the \mathbf{F}_2^\dagger are regular. Therefore the manifold \mathbf{S}_2 is not the same as \mathbf{S} and we reach the non trivial conclusion that $\hat{\mathbf{L}}$, the operator normally used in the description of infinite -or, in the event- semiinfinite regular media is *not totally Hermitean*.

Although a full analysis in general terms⁽¹⁶⁾, §7.5) of the conditions at infinity is outside the scope of this article, it is in order to recall that while regularity at infinity is the physical requirement in the stationary state -time independent- picture, causality is the condition required in standard physical theory, and this in turn requires ω to be defined as the limit of $(\omega + i\eta)$ for $\eta \rightarrow 0$. Now, for the class of problems here considered ω bears a direct relation to the eigenvalue variable Ω . For instance, for electronic states Ω is the energy and ω is Ω/\hbar ; for most wave problems ω is $\Omega^{1/2}$, etc. Then the causal formulation amounts to requiring that Ω is to be read everywhere as

$$\Omega = \lim_{\eta \rightarrow 0} (\Omega + i\eta). \quad (21)$$

Even for bound states, for which the eigenvalue is real, a small imaginary part may have to be added in practice, for instance, when calculating spectral functions numerically with a computer code. The point to stress is that (21) must be kept as such everywhere and this has a direct bearing on the foregoing analysis.

It is correct to define $\hat{\mathbf{L}}^\dagger$, the *Hermitean conjugate* of an operator $\hat{\mathbf{L}}$ as has been done, but in the matrices resulting in the z -representation, where Ω appears explicitly, it must always be kept $\Omega + i\eta$, whether η stays small but finite or it tends to zero as in (21). In other words, while the standard *Hermitean conjugate* of a matrix of the general form

$$\mathbf{m}(\Omega) = \mathbf{m}_1(\Omega) + i\mathbf{m}_2(\Omega) \quad (22)$$

is

$$\mathbf{m}^\dagger(\Omega) = \mathbf{m}_1^\dagger(\Omega^*) - i\mathbf{m}_2^\dagger(\Omega^*), \quad (23)$$

this is not the concept required for an explicit matrix analysis of the problems here considered. The concept of *transconjugate* matrix

$$\mathbf{m}^c(\Omega) = \mathbf{m}_1^\dagger(\Omega) - i\mathbf{m}_2^\dagger(\Omega) \quad (24)$$

was used in⁶ where the relationship between the standard transfer matrix \mathbf{M} and the Green function \mathbf{G} was established. This was further developed in¹. If

one used \mathbf{m}^\dagger instead of \mathbf{m}^c , then one would obtain a negative density of states. We now relate \mathbf{G} to \mathbf{T} , defined in (4), while extending significantly the analysis.

V. THE RELATIONSHIP BETWEEN G AND T

We now start from

$$\mathbf{L}(z) \cdot \mathbf{G}(z, z') = \mathbf{I}_N \delta(z - z'), \quad (25)$$

where \mathbf{I}_N is the $N \times N$ unit matrix and $\mathbf{L}(z)$ is the differential matrix of (1) but, instead of $\mathbf{A}(z)$ of (2), the differential form is now

$$\mathbf{A}(z, z') = \mathbf{B}(z) \cdot \frac{\partial \mathbf{G}(z, z')}{\partial z} + \mathbf{P}(z) \cdot \mathbf{G}(z, z'). \quad (26)$$

Defining

$$\mathbf{A}^\pm(z) = \lim_{z' \rightarrow z \pm 0} \mathbf{A}(z, z'), \quad (27)$$

a first integration of (25) yields the identity

$$\mathbf{A}^+(z) - \mathbf{A}^-(z) = -\mathbf{I}_N. \quad (28)$$

Furthermore, a detailed formal analysis of (25) shows¹⁶ that if we define

$$\mathbf{Z}(z, z') = \frac{\partial \mathbf{G}(z, z')}{\partial z'} \cdot \mathbf{B}^c(z') + \mathbf{G}(z, z') \cdot \mathbf{P}^c(z'). \quad (29)$$

and hence

$$\pm \mathbf{Z}(z) = \lim_{z' \rightarrow z \mp 0} \mathbf{Z}(z, z'), \quad (30)$$

then there is another identity, namely

$$\pm \mathbf{Z}(z) - \mathbf{Z}(z) = -\mathbf{I}_N. \quad (31)$$

It is now convenient to display \mathbf{T} in the form

$$\mathbf{T} = \begin{vmatrix} \mathbf{T}_{AA} & \mathbf{T}_{AD} \\ \mathbf{T}_{DA} & \mathbf{T}_{DD} \end{vmatrix}, \quad (32)$$

where the submatrices $\mathbf{T}_{\alpha\beta}$ ($\alpha, \beta = A, D$) are $N \times N$. Then, similarly to (3), we define the rectangular $2N \times N$ matrix

$$\Gamma(z, z') = \begin{vmatrix} \mathbf{G}(z, z') \\ \mathbf{A}(z, z') \end{vmatrix}, \quad (33)$$

and thus

$$\Gamma(z, z') = \mathbf{T}(z, z_0) \cdot \Gamma(z_0, z'), \quad (34)$$

that is to say, for fixed z' $\Gamma(z, z')$ is transferred like $\Psi(z)$ and, in particular

$$\mathbf{G}(z, z') = \mathbf{T}_{AA}(z, z_0) \cdot \mathbf{G}(z_0, z') + \mathbf{T}_{AD}(z, z_0) \cdot \mathbf{A}(z_0, z'). \quad (35)$$

A similar analysis can be carried out with the Green function of the Hermitean conjugate differential system, which has the same ATM. This leads to a formula analogous to (35) in which $\mathbf{T}^c(z', z_0)$, acting from the right, transfers in z' with z fixed.

Following this line of argument and recalling that the definition of \mathbf{T} does not depend on the choice of z_0 , we arrive -details in¹⁶- at a general expression for \mathbf{G} in terms of \mathbf{T} of the form

$$\mathbf{G}(z, z') = \begin{cases} \sum_{\alpha\beta} \mathbf{T}_{A\alpha}(z, z_0) \cdot \mathbf{C}_{\alpha\beta}^< \cdot \mathbf{T}_{A\beta}^c(z', z_0) & z \leq z' \\ \sum_{\alpha\beta} \mathbf{T}_{A\alpha}(z, z_0) \cdot \mathbf{C}_{\alpha\beta}^> \cdot \mathbf{T}_{A\beta}^c(z', z_0) & z \geq z' \end{cases} \quad (36)$$

for any pair of values of (z, z') irrespective of the position of z_0 . Hence

$$\mathbf{A}(z, z') = \begin{cases} \sum_{\alpha\beta} \mathbf{T}_{D\alpha}(z, z_0) \cdot \mathbf{C}_{\alpha\beta}^< \cdot \mathbf{T}_{A\beta}^c(z', z_0) & z \leq z' \\ \sum_{\alpha\beta} \mathbf{T}_{D\alpha}(z, z_0) \cdot \mathbf{C}_{\alpha\beta}^> \cdot \mathbf{T}_{A\beta}^c(z', z_0) & z \geq z' \end{cases}. \quad (37)$$

Not all the eight (matrix) coefficients $\mathbf{C}_{\alpha\beta}^>, \mathbf{C}_{\alpha\beta}^<$ are independent. Firstly, whether we proceed from the first or the second row of (36), we must obtain

$$\mathcal{G}(z) \equiv \mathbf{G}(z, z') = \mathbf{C}_{AA}^< = \mathbf{C}_{AA}^> \equiv \mathbf{C}_{AA} \quad (38)$$

Then, from (28) and (37):

$$\mathbf{C}_{DA}^< - \mathbf{C}_{DA}^> = -\mathbf{I}_N. \quad (39)$$

Furthermore, an expression for $\mathbf{Z}(z, z')$ (29) can be obtained similar to (37) and then, from (31)

$$\mathbf{C}_{AD}^> - \mathbf{C}_{AD}^< = -\mathbf{I}_N. \quad (40)$$

Now, consider the configuration $z \leq z_0 \leq z'$, Then¹

$$\mathbf{G}(z, z') = \mathbf{G}(z, z_0) \cdot [\mathcal{G}(z_0)]^{-1} \cdot \mathbf{G}(z_0, z'). \quad (41)$$

From this and the above equalities -together with the similar expressions for $\mathbf{Z}(z, z')$ - we obtain

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_{DD}^< &= \mathbf{C}_{DA}^< \cdot \mathbf{C}_{AA}^{-1} \cdot \mathbf{C}_{AD}^< ; \\ \mathbf{C}_{DD}^> &= \mathbf{C}_{DA}^> \cdot \mathbf{C}_{AA}^{-1} \cdot \mathbf{C}_{AD}^> . \end{aligned} \quad (42)$$

These relationships hold quite generally and reduce the independent coefficients. The rest of the analysis depends on the domain under study.

For the finite internal domains of a heterostructure, it was shown in¹⁵ that one can define any arbitrary extended pseudomedium with a Green function satisfying arbitrary boundary conditions -except for infinite barriers- at the extremes of the said domains. In practice a considerable simplification of the algebra can be achieved in this way. The external domains are different. Sometimes they are terminated by infinite barriers, which is part of the model. The algebra is then fairly simple. A different situation arises if the external domains are assumed to extend to infinity. We now consider an infinite regular medium, which is in any case always a valid description for any domain, even if it is finite or semiinfinite.

We take $z_0 = 0$ and abbreviate $\mathbf{T}_{\alpha\beta}(z, z_0)/\mathbf{T}_{\alpha\beta}(z', z_0)$ as $\mathbf{T}_{\alpha\beta}(z)/\mathbf{T}_{\alpha\beta}(z')$. Consider the first row of (36) and take $z' = 0$. Then

$$\mathbf{G}(z, 0) = \mathbf{T}_{AD}(z) \cdot \left\{ [\mathbf{T}_{AD}(z)]^{-1} \dot{\mathbf{T}}_{AA}(z) \cdot \mathbf{C}_{AA} + \mathbf{C}_{DA}^< \right\} \quad (43)$$

Regularity at $-\infty$ requires the vanishing of the *regular limit* of (43). To this effect we note that even if the coefficients of the differential system are variable, for sufficient large $|z|$ these can be asymptotically "flattened" -i.e. replaced by their average values- at sufficiently large distances without essential loss of accuracy. Then \mathbf{T} can be written as $\mathbf{T}(\epsilon, z)$ and regular limits taken in the manner of (19)-(20), so we define the regular limits

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_{\pm} &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \lim_{z \rightarrow \pm\infty} \left\{ [\mathbf{T}_{AD}(\epsilon, z)]^{-1} \cdot \mathbf{T}_{AA}(\epsilon, z) \right\} \\ \Theta_{\pm} &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \lim_{z \rightarrow \pm\infty} \left\{ \mathbf{T}_{AA}^c(\epsilon, z) \cdot [\mathbf{T}_{AD}^c(\epsilon, z)]^{-1} \right\} . \end{aligned} \quad (44)$$

Now, the first factor of (43) has asymptotic oscillatory behaviour. Thus the regular vanishing of $\mathbf{G}(-\infty, 0)$ requires the vanishing of the second factor in the regular limit. Following this line of argument and using the general identities just presented, we obtain the full set of parameters for the regular Green function

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_{AA} &= [\mathbf{T}_- \cdot \mathbf{T}_+]^{-1}, \\ \mathbf{C}_{DA}^< &= -\mathbf{T}_- \cdot \mathbf{C}_{AA}, \quad \mathbf{C}_{DA}^> = -\mathbf{T}_+ \cdot \mathbf{C}_{AA}, \\ \mathbf{C}_{AD}^< &= -\mathbf{C}_{AA} \cdot \Theta_+, \quad \mathbf{C}_{AD}^> = -\mathbf{C}_{AA} \cdot \Theta_-, \\ \mathbf{C}_{DD}^< &= -\mathbf{T}_- \cdot \mathbf{C}_{AA} \cdot \Theta_+, \quad \mathbf{C}_{DD}^> = \mathbf{T}_+ \cdot \mathbf{C}_{AA} \cdot \Theta_- \end{aligned} \quad (45)$$

The regular Green function is thus fully determined from \mathbf{T} . The latter is always an ultimate resort if the analytical solution is not viable, while \mathbf{G} is a natural object to extract physical information directly from it. As indicated above, the set of parameters $\mathbf{C}_{\alpha\beta}^<, \mathbf{C}_{\alpha\beta}^>$ can be considerably simplified by the convenient choice of simpler boundary condition.

VI. THE SYMPLECTIC CHARACTER AND GENERAL PROPERTIES OF \mathbf{T}

Firstly we note that, due to the fact that the two fields transferred by \mathbf{T} are continuous everywhere, on crossing interfaces separating different media \mathbf{T} is obtained by simple chain multiplication of the corresponding different matrices. This is a practical useful feature for the description of heterostructures, not shared by \mathbf{M} ¹⁵. Furthermore, let us define the $2N \times 2N$ auxiliary matrix

$$\mathbf{J} = \begin{vmatrix} \mathbf{O}_N & -\mathbf{I}_N \\ \mathbf{I}_N & \mathbf{O}_N \end{vmatrix} . \quad (46)$$

Then

$$\Psi^c \cdot \mathbf{J} \cdot \Psi = -\mathbf{F}^c \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A}^c \cdot \mathbf{F} . \quad (47)$$

Now, the general definition of the flux density is

$$j(z) = i[\mathbf{F}^c(z) \cdot \mathbf{A}(z) - \mathbf{A}^c(z) \cdot \mathbf{F}(z)] = -i \Psi^c(z) \cdot \mathbf{J} \cdot \Psi(z) \quad (48)$$

On the other hand, the second order differential system for \mathbf{F} is transformed in the standard way into the first order differential system for Ψ ,

$$\frac{d\Psi(z)}{dz} = \mathbf{D}(z) \cdot \Psi(z) \quad (49)$$

with

$$\mathbf{D}(z) = \begin{vmatrix} -\mathbf{B}^{-1}(z) \cdot \mathbf{P}(z) & \mathbf{B}^{-1}(z) \\ \mathbf{Y}(z) \cdot \mathbf{B}^{-1}(z) \cdot \mathbf{P}^{-1}(z) \cdot \mathbf{W}(z) & -\mathbf{Y}(z) \cdot \mathbf{B}^{-1}(z) \end{vmatrix} . \quad (50)$$

It is easily seen that

$$\frac{d}{dz} [\mathbf{F}^c \cdot \mathbf{A} - \mathbf{A}^c \cdot \mathbf{F}] = -\Psi^c \cdot [\mathbf{D}^c \cdot \mathbf{J} + \mathbf{J} \cdot \mathbf{D}] \cdot \Psi. \quad (51)$$

Then, since

$$\mathbf{D}^c \cdot \mathbf{J} + \mathbf{J} \cdot \mathbf{D} = \mathbf{O}_{2N} \quad (52)$$

it follows that $j(z)$ is constant everywhere, which is a general expression of the continuity equation.

Now consider any arbitrary pair of points (z_0, z) , transfer Ψ from z_0 to z , write $\mathbf{T}(z, z_0)$ for brevity as \mathbf{T} and equate $j(z)$ to $j(z_0)$. This yields

$$\mathbf{J} = \mathbf{T}^c \cdot \mathbf{J} \cdot \mathbf{T} \quad (53)$$

Thus \mathbf{T} is a symplectic matrix in a general sense¹⁷. Since \mathbf{J} has unit determinant, it follows that

$$|\text{Det}[\mathbf{T}]|^2 = 1 \quad (54)$$

This provides a concise practical rule which can be used to monitor the quality of the numerical computations as z grows away from z_0 . Furthermore, by equating the submatrices of (53) we obtain the three independent identities

$$\mathbf{T}_{AA}^c \cdot \mathbf{T}_{DA} - \mathbf{T}_{DA}^c \cdot \mathbf{T}_{AA} = \mathbf{O}_N \quad (55)$$

$$\mathbf{T}_{DD}^c \cdot \mathbf{T}_{AD} - \mathbf{T}_{AD}^c \cdot \mathbf{T}_{DD} = \mathbf{O}_N \quad (56)$$

$$\mathbf{T}_{AA}^c \cdot \mathbf{T}_{DD} - \mathbf{T}_{DA}^c \cdot \mathbf{T}_{AD} = \mathbf{I}_N. \quad (57)$$

These can also prove useful in two ways, namely: (i) they can help simplify the algebra in the analytical formulation of a problem and (ii) other concise rules for numerical monitoring can also be extracted from them.

Further details and different ways to combine \mathbf{T} and \mathbf{G} for the study of multilayer heterostructures are given in¹⁶.

VII. CONCLUSION

The Associated Transfer Matrix \mathbf{T} appears to be both, formally appealing and practically useful. It suggests itself in a natural way from the physics of the problem. It is unique and does not depend on having an analytical basis, so it can always be an ultimate resort, obtainable by numerical integration. It satisfies some general identities, not satisfied by other transfer matrices, which provides useful rules to monitor the numerical quality of computational processes. Finally, it is directly related to the Green function, from which direct physical information follows in a natural way.

ACKNOWLEDGEMENTS

This work was done while one of us (R P-A) was enjoying the hospitality and financial support of the Universitat "Jaume I"- Castellón de la Plana, Spain- which is here gratefully acknowledged. We also express our appreciation for the invaluable help of Pilar Jiménez in the preparation of the article.

REFERENCES

- ¹GARCÍA-MOLINER, F. and V.R. VELASCO (1992): **Theory of Single and Multiple Interfaces** (Singapore: World Scientific).
- ²VINTER, B. and C. WEISBUCH (1991): **Quantum Semiconductor Structures** (San Diego: Academic Press).
- ³PÉREZ-ÁLVAREZ, R. and F. GARCÍA-MOLINER (2000): "The spectrum of quasiregular heterostructures", in **Some Contemporary Problems of Condensed Matter Physics** ed S. Vlaev and M. Gaggero-Sager (New York: Nova Science).
- ⁴MERLIN, R.; K. BAJEMA; R. CLARKE; F-Y. JUANG and P.K. BHATTACHARYA (1985): **Phys. Rev. Lett.** 55, 1768.
- ⁵PÉREZ-ÁLVAREZ, R.; F. GARCÍA-MOLINER and V.R. VELASCO (1995): **J. Phys.: Condens. Matter** 7, 2037.
- ⁶GARCÍA-MOLINER, F.; R. PÉREZ-ÁLVAREZ; H. RODRIGUEZ-COPPOLA and V.R. VELASCO (1990): **J. Phys. A: Math. Gen.** 23, 1405.
- ⁷PÉREZ-ÁLVAREZ, R.; C. TRALLERO-HERRERO and F. GARCÍA-MOLINER (2001): **Eur. J. Phys.** 22, 275.

- ⁸VELASCO, V.R. (2000): "Study of many interfaces and inhomogeneous systems by means of the surface Green function matching and the transfer matrix methods, in **Some Contemporary Problems of Condensed Matter Physics** ed S. Vlaev and M. Gaggero-Sager (New York: Nova Science).
- ⁹SZMULOWICZ, F. **et al.** (2003): **Phys. Rev.** B68, 085305.
- ¹⁰RÖSSLER, U. (1984): **Solid State Commun.** 49, 943.
- ¹¹KITCHIN, M.R. (1999): "A theoretical thesis submitted to the University of Newcastle upon Tyne for the degree of Doctor of Philosophy.
- KITCHIN, M.R.; M.J. SHAW; E. CORBIN; J.P. HAGON and M. JAROS (2002): **Applied Surface Science** 166, 35.
- KITCHIN, M.R.; M.J. SHAW; E. CORBIN; J.P. HAGON and M. JAROS (2002): **Phys Rev.** B61, 8375 (2000)
- ¹²ERDÖS, P. and R.C. HERNDON (1982): **Advances in Physics** 31, 65.
- ¹³PEREYRA, P. (1995): **J. Math. Phys.** 36, 1166.
- ¹⁴FRIEDMAN, B. (1956): **Principles and techniques of applied mathematics** (New York: J. Wiley).
- ¹⁵PÉREZ-ÁLVAREZ, R., H. RODRÍGUEZ-COPPOLA; V.R. VELASCO and F. GARCÍA-MOLINER (1988): **J. Phys. C: Solid State Phys.** 21, 2197.
- ¹⁶PÉREZ-ÁLVAREZ, R. and F. GARCÍA-MOLINER (2004): **Transfer matrix, Green Function and related techniques: Tools for the study of multilayer heterostructures** (Castellón de la Plana, Spain: publication of Universitar "Jaume I").
- ¹⁷ARVIND DUTTA, B.; N. MUKUNDA and B. SIMON (1995): **Pramana** 45, 471.
- MEHL, C., V. MEHRMANN and H. XU (2000): **Electronic J. Lin. Alg.** 7, 112.

INFLUENCIA DEL ANCHO DE BANDA ESPECTRAL DE LA LUZ EN LAS MEDICIONES POLARIMÉTRICAS EN LA ZONA VISIBLE E INFRARROJA

V. Fajer¹; J.C.; López; J. Ravelo; W. Mora; H. Fernández y G. Cossío
Centro de Aplicaciones Tecnológicas y Desarrollo Nuclear

RESUMEN

La necesidad de eliminar el subacetato de plomo en las mediciones de control en las fábricas de azúcar, ha dado lugar a un trabajo intenso en la dirección de emplear el intervalo de longitudes de onda comprendidas entre 0.780 y 0.900 μm en las fuentes de luz empleadas en los polarímetros automáticos. El ancho espectral de dichas fuentes constituye un aspecto crítico para su aplicación en estos instrumentos debido a la influencia de la longitud de onda en la rotación angular óptica. La ventaja que ofrece el principio magnetoóptico de medición se analiza y se compara con el método de medición directo. Se confirman los resultados obtenidos al valorar el comportamiento en mediciones azucareras de un polarímetro magnetoóptico desarrollado que utiliza un diodo láser de 0.783 μm .

Palabras claves: polarímetros, infrarrojo, diodos láser, dispersión rotatoria, magnetoóptica.

ABSTRACT

The necessity of eliminating lead acetate in the control measurements of the sugar factories, has originated an intensive work in the employment of wavelengths in the range from 0,780 to 0,900 μm for light sources used in automatic polarimeters. The spectral bandwidth of these sources constitutes a critical aspect for its application in these instruments, due to the strong influence of the wavelength in the optical angular rotation. The advantage that offers the magneto-optic principle is analyzed and it is compared with the direct measuring method. The results obtained in the measurements with a polarimeter that employs a 0.783 μm diode laser as light source, confirm the validity of employment of the diode laser.

Key words: polarimeter, infrared, diode laser, rotary dispersion, magneto-optic.

INTRODUCCIÓN

La disminución del empleo del subacetato de plomo en la clarificación en las industrias y laboratorios es una cuestión de extraordinaria atención debido a la incidencia nociva de esta sustancia en la naturaleza, especialmente en la naturaleza animal. El empleo de fuentes infrarrojas en polarímetros permite la eliminación de este agente contaminante en los análisis de control [1], [2], [3].

Los instrumentos que han sido diseñados para estos fines emplean principalmente, lámparas de tungsteno-halógeno como fuentes de luz y filtros de interferencia. La fuerte influencia del ancho espectral de la luz en las mediciones polarimétricas obliga su estudio para valorar la factibilidad de empleo de distintas fuentes luminosas en los polarímetros automáticos. La absorción de los azúcares y subproductos también resulta importante para la elección de dicha fuente.

Existe una fuerte tendencia de empleo de los diodos láser en el diseño y construcción de instrumentos ópticos por sus ventajas, sus posibilidades de uso tienen vinculación con el sistema de medición que se escoja por los proyectistas de instrumentos. En el presente trabajo se analiza teórica y experimentalmente la viabilidad del empleo de esta fuente de luz en polarímetros automáticos.

MEDICIONES EXPERIMENTALES Y MODELO TEÓRICO

Una de las fuentes de luz más eficientes y modernas que emite en el mencionado intervalo es el diodo láser, sin embargo su ancho de banda espectral puede hacer cuestionable su empleo en polarimetría dados los fuertes requisitos de ancho de banda espectral exigidos para algunos esquemas de trabajo no magneto-ópticos.

E-mail: ¹vfajer@fisica.uh.cu

Tabla I. Comparación entre las características de los láseres utilizados en polarímetros automáticos.

Características	Láser de He-Ne	Diodo láser infrarrojo
Longitud de onda(λ) (μm)	0.6328	0.783
Ancho de banda del espectro de emisión (MHz)	1 (monomodo)	> 20 a)
Divergencia (mrad)	≈ 1	$\approx 10^2$ b)
Consumo (W)	≈ 10	≤ 1
Eficiencia total (%)	≈ 0.1	> 20
Tiempo de vida (h)	20 000	> 50 000 c)

a) Ancho de banda del espectro de emisión.

b) La gran divergencia, en lo que a láser concierne también puede ser reducida hasta el orden de 1 mrad, empleando un sistema óptico simple.

c) El tiempo de vida del dispositivo puede duplicarse por cada reducción de 10 °C y viceversa.

Dos aspectos de primera importancia requieren ser analizados para valorar la factibilidad de empleo de las fuentes luminosas: el ancho espectral admisible de acuerdo con el principio de medición empleado y la absorción de las soluciones de azúcar, jugos y mieles en el intervalo infrarrojo.

Debido a la semejanza entre las dispersiones rotatorias de los azúcares en general y de los vidrios utilizados en las celdas de Faraday (flint pesados), resulta atractivo pensar en el empleo de los diodos láser en polarímetros automáticos que utilicen el sistema magneto-óptico. En el presente trabajo se valora analíticamente la factibilidad del empleo de los diodos láser utilizando el principio de medición referido.

La utilización del efecto magneto-óptico ha sido ampliamente difundida en los aisladores ópticos, en los láseres y también se ha empleado con éxito en la construcción de polarímetros [4], [5].

Este efecto consiste en la rotación del plano de polarización de la radiación durante su paso a través de un material colocado en un campo magnético. El valor de la rotación está dada por:

$$\theta = BIV \quad (1)$$

donde B es la componente de la intensidad del campo magnético paralela a la dirección de propagación, I es la longitud del material colocado bajo la acción del campo y V es la denominada constante de Verdet, que es una medida de la capacidad del material magneto-óptico para rotar el plano de polarización de la luz.

Mediciones de absorción de azúcares y mieles

Para valorar la absorción de los azúcares y mieles obtenidos en el proceso de producción azucarera se midieron en un espectrofotómetro Unicam 25 muestras de azúcares crudos y 25 muestras de mieles.

Se observó una curva decreciente con tendencia predominante del tipo inversamente proporcional al cuadrado de la longitud de onda y como aspecto de interés una depresión en la longitud de onda de 0.960 μm en el caso de los azúcares, no presente en el caso de las mieles.

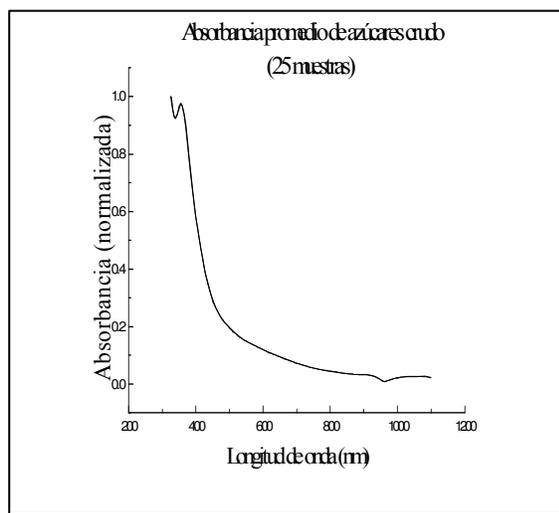


Figura 1. Curva de absorción de los azúcares crudos.

Las curvas obtenidas corroboran la validez de empleo de la longitud de onda de 0.783 μm , en la longitud de onda de 0.880 μm existe menor absorción y significativamente menor se presenta la misma a 0.960 μm . Esto resulta un hecho de interés

al constituir el promedio de la medición de 25 muestras y puede hacer aconsejable el empleo de esta última longitud de onda en los polarímetros infrarrojos.

Tabla II. Valores de absorción de la luz en azúcares crudos.

Longitud de onda (nm)	Azúcares crudos	Desviación típica
545	0,329	0,066
590	0,267	0,056
630	0,218	0,050
785	0,092	0,033
880	0,060	0,027
960	0,006	0,022
1060	0,045	0,018

Los valores de absorbancia que aparecen en la Tabla II junto a los valores de la desviación típica de la medición sugieren el empleo de fuentes luminosas de 960 nm en el diseño de polarímetros infrarrojos.

Influencia de la longitud de onda en el infrarrojo cercano para las longitudes de onda más utilizadas en polarimetría

En la Tabla III se muestran los valores de la dispersión rotatoria de la sacarosa, el cuarzo y el vidrio flint pesado SF-59. Esta coincidencia de los valores de la dispersión rotatoria ha sido la base del

empleo en sacarímetros de cuñas de cuarzo de la luz blanca y constituye el fundamento del análisis de los autores de las ventajas del método magneto-óptico para el uso de los diodos láseres con relación al método de medición angular directo.

A continuación se presentan las distintas fórmulas [3, 6] empleadas para la obtención de los valores de la dispersión rotatoria mostradas en la Tabla III.

Dispersión rotatoria del cuarzo:

$$[\alpha_\lambda] = a_0 + a_1 \cdot \lambda^{-2} + a_2 \cdot \lambda^{-4} + a_3 \cdot \lambda^{-6} \quad (2)$$

donde: $[\alpha_\lambda]$ es la rotación angular en grados y λ representa la longitud de onda en μm ,

$$a_0 = -0.1963657, \quad a_1 = 7.262667,$$

$$a_2 = 0.1171867, \quad a_3 = 0.0019554.$$

Dispersión rotatoria para una solución de sacarosa:

$$[\alpha_\lambda] = [\alpha_{546}] / (a_0 + a_1 a_1 \lambda^2 + a_2 \lambda^4 + a_3 \lambda^6) \quad (3)$$

donde $a_0 = -0.075047659, \quad a_1 = 3.588221,$

$$a_2 = 0.0519461783, \quad a_3 = -0.006515194677$$

Dispersión rotatoria para el vidrio SF59

$$[\alpha_\lambda] = 3.0857 (\eta_\lambda^2 - 1) (\eta_\lambda \lambda)^{-1} (a_0 + a_1 / (\lambda^2 - \lambda_0^2)) \quad (4)$$

$$a_0 = 2.2638, \quad a_1 = 0.68410, \quad \lambda_0 = 0.1753$$

Tabla III. Valores obtenidos de los giros producidos por la sacarosa y por la celda de Faraday que utiliza un vidrio flint pesado SF-59.

Long.de onda (μm)	F59 (min/Oecm)	Giro de la celda ($^\circ$)	Sacarosa ($^\circ$)	Diferencia magneto-óptico ($^\circ$)	Diferencia Método directo ($^\circ$)
0.78293	0.066614	19.0323	19.0328	0.00051	0.00355
0.78294	0.066613	19.0318	19.0323	0.00044	0.00304
0.78295	0.066611	19.0314	19.0318	0.00037	0.00253
0.78296	0.066610	19.0310	19.0313	0.00029	0.00203
0.78297	0.066608	19.0305	19.0308	0.00022	0.00152
0.78298	0.066607	19.0301	19.0303	0.00015	0.00101
0.78299	0.066605	19.0297	19.0297	0.00007	0.00051
0.78300	0.066604	19.0292	19.0292	0.00000	0.00000
0.78301	0.066602	19.0288	19.0287	-0.00007	-0.00051
0.78302	0.066601	19.0284	19.0282	-0.00015	-0.00101
0.78303	0.066599	19.0279	19.0277	-0.00022	-0.00152
0.78304	0.066598	19.0275	19.0272	-0.00029	-0.00203
0.78305	0.066596	19.0271	19.0267	-0.00037	-0.00253
0.78306	0.066595	19.0266	19.0262	-0.00044	-0.00304
0.78307	0.066593	19.0262	19.0257	-0.00051	-0.00355

donde n_λ es el índice de refracción para la longitud de onda λ dado por la fórmula de dispersión para el vidrio SF59:

$$n_\lambda = \sqrt{(1 + (a_1 \lambda^2 / (\lambda^2 - b_1)) + a_2 \lambda^2 / (\lambda^2 - b_2)) + a_3 \lambda^2 / (\lambda^2 - b_3))} \quad (5)$$

$$a_1 = 2.05775824, \quad a_2 = 0.528644661, \quad a_3 = 1.00043574,$$

$$b_1 = 0.01677996, \quad b_2 = 0.06553358, \quad b_3 = 1.10E + 02$$

la longitud de onda está en μm .

Descripción y mediciones en el polarímetro magnetoóptico

Se introdujo un láser semiconductor de $0.783 \mu\text{m}$ en un polarímetro automático de la serie LASERPOL diseñado y construido en el CEADEN con vistas a comprobar experimentalmente la factibilidad de empleo del mismo para la medición de muestras de jugo de caña sin utilizar la clarificación con subacetato de Pb.

El LASERPOL NIR está proyectado sobre la base del principio magneto-óptico de medición concebido por los autores [4,5]. Se seleccionó el láser semiconductor de $0.783 \mu\text{m}$ debido a su amplia utilización en diferentes ramas de la técnica, su fácil adquisición y bajo costo.

El instrumento mide dentro del intervalo de medición en grados angulares de -1.1° a $+1.1^\circ$; tiene una exactitud de $\pm 0.005^\circ$, un mínimo de transmisión de la sustancia (a $0.783 \mu\text{m}$) de 4% y una longitud máxima del tubo polarimétrico de 100 mm . Las muestras de productos azucareros se midieron también con un polarímetro alemán SUCROMAT que emplea la longitud de onda de $0.880 \mu\text{m}$ que se utiliza como referencia.

DISCUSIÓN DE LOS RESULTADOS

Los resultados de las mediciones de absorción en azúcares se muestran en la Figura 1 donde se observa la fuerte tendencia a disminuir la absorción desde la zona visible hacia la infrarroja, lo cual favorece el empleo de la zona infrarroja cercana con el objetivo de realizar mediciones sin clarificar. Adicionalmente se muestra una interesante disminución en el valor de $0.960 \mu\text{m}$.

En la Tabla IV se resumen los resultados de las mediciones polarimétricas realizadas con jugos de caña. Se hicieron 50 mediciones con 3 placas de cuarzo de 0.623° , 0.459° y -0.461° y se obtuvieron las siguientes incertidumbres: 0.002° , 0.002° y 0.003° respectivamente. Se realizaron 30 mediciones dobles, (dos muestras por cada medición) de jugos de caña clarificados (C) y sin clarificar (S/C) con el LASERPOL NIR.

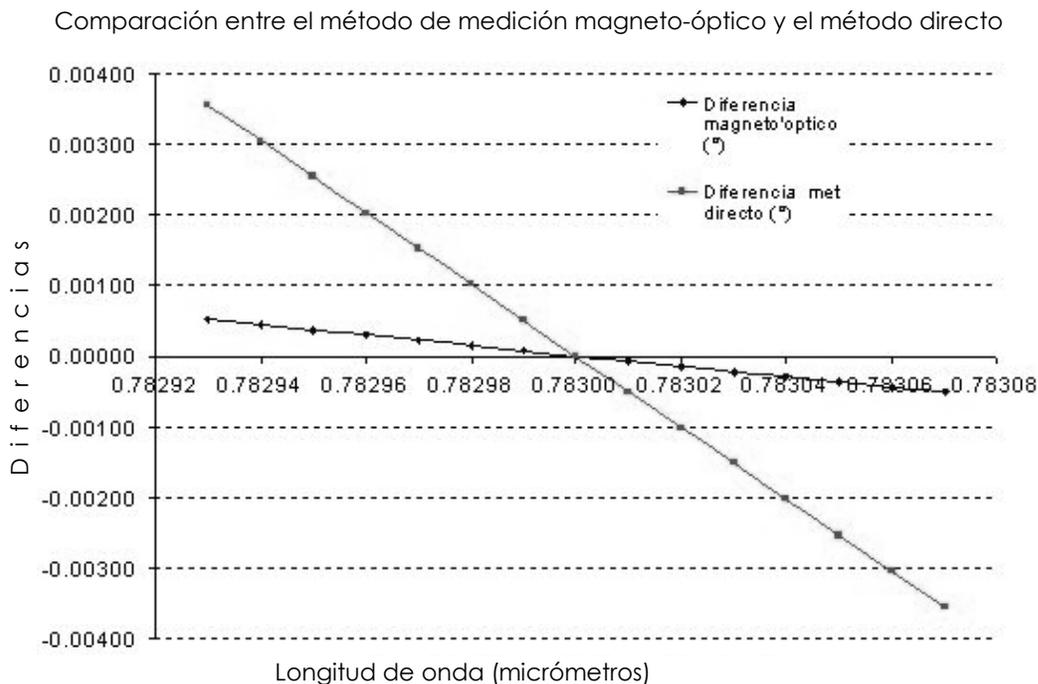


Figura 2. Diferencias entre los valores obtenidos por el método directo y el magneto-óptico al variar la longitud de onda alrededor de $0.783 \mu\text{m}$.

Tabla IV. Resultados de los análisis de jugos de caña en los 2 polarímetros

	Diferencias (S/C-C)	
	SUCROMAT	LASERPOL
Media de las diferencias	0.001°	0.001°
Desviación estándar de las diferencias	0.003°	0.005°

Se observa muy buena concordancia entre los resultados de ambos instrumentos, lo que avala la posibilidad de empleo del diodo láser de 0.783 μm cuando se utiliza el método magnetoóptico de medición.

Basados en las fórmulas empíricas que describen la dispersión rotatoria de los materiales antes mencionados se realizaron los cálculos correspondientes y se obtuvieron los siguientes resultados:

- Para el método de medición angular directa:

Variaciones en longitud de onda

$$\Delta\lambda = 0.000\ 03\ \mu\text{m}\ \text{origina variaciones de } \Delta\theta = 0.0015^\circ.$$

- Para el método de medición magneto-óptico:

Variaciones en longitud de onda

$$\Delta\lambda = 0.000\ 03\ \mu\text{m}\ \text{originan variaciones de } \Delta\theta = 0.0002^\circ.$$

Se observa la ventaja del método magnetoóptico en cuanto a la disminución de la influencia de la longitud de onda, se confirma la viabilidad de uso de los diodos láser cuando se emplea el método

magneto-óptico. Las predicciones teóricas fueron confirmadas experimentalmente al incluir un diodo láser de 0.783 μm como fuente de luz de un polarímetro magneto-óptico. Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla IV.

CONCLUSIONES

- La absorbancia de la luz en los jugos de caña para la longitud de onda de 0.783 μm permite eliminar el subacetato de Pb en los análisis polarimétricos.
- La longitud de onda de 0.960 μm debe estudiarse como valor óptimo en la construcción de polarímetros infrarrojos por su ventaja en cuanto a absorción relativa a la longitud de 0.880 μm , utilizada en la mayoría de los polarímetros infrarrojos.
- El diodo láser constituye una fuente de luz atractiva en aplicaciones de polarimetría cuando se emplea el principio de medición magneto-óptico.
- El método magneto-óptico disminuye de forma significativa la influencia negativa de la inestabilidad o incertidumbre en la longitud onda.

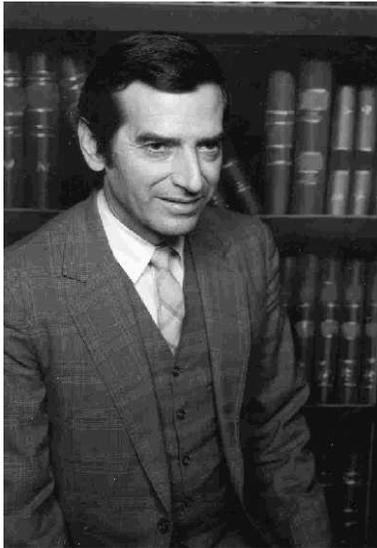
AGRADECIMIENTOS

Expresamos nuestro agradecimiento a los especialistas del Departamento de Investigaciones Analíticas de la Subdirección de Química del Instituto Cubano de Investigaciones Azucareras por la colaboración brindada.

REFERENCIAS

- [1] DUNSMORE, A. (1993): "The quest to eliminate the use of lead in the laboratory", Part 2. **Proceedings of the South African Technologists Association**. June.
- [2] CHEN, J. (1993): "Some comments on NIR-polarimetry". **Int. Sugar JNL**, 95(1129).
- [3] EMMERIC, A.; J. KEITEL; M. MOSCHE and W. SEILER (1997): "Rotatory dispersion of sucrose solutions and quartz in the near infrared". **Report ICUMSA 1897-1997**, 9-19.
- [4] FAJER, V. et al. (1998): **Electronic polarimeter**. U K Patent. GB2286244A.
- [5] FAJER, V. (1996): "Laser polarimeters: Overview of recent developments, design and applications". **Journal of laser applications** 8, 43-53.
- [6] KEITEL, J. (1997): "Polarimetry and Quartz Plates", **Subject 4. Proceedings of ICUMSA**, 20.

Coloquio Nacional de Física Teórica en homenaje a Elías Entralgo Herrero



Elías Entralgo Herrero

Los días 1 y 2 del pasado mes de abril de 2004 tuvo lugar en la Facultad de Física de la Universidad de La Habana el Coloquio Nacional de Física Teórica en homenaje al profesor Elías Entralgo Herrero, en ocasión del primer aniversario de su fallecimiento. Este evento fue organizado por la Sección de Física Teórica de la Sociedad Cubana de Física y contó con el auspicio del Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas, el Instituto de Cibernética, Matemática y Física, y de la Facultad de Física de la Universidad de La Habana. El Coloquio fue concebido un año atrás como una de las vías que tiene la Sociedad Cubana de Física para incentivar el conocimiento mutuo y la cooperación entre físicos de campos afines y de diversas instituciones, con objetivos muy concretos y medios extremadamente modestos.

El Coloquio contó con casi 30 participantes de más de 10 instituciones diferentes. Se presentaron conferencias a cargo de los premiados en los últimos años por la

Academia de Ciencias de Cuaba y una veintena de trabajos de los distintos grupos que hacen Física Teórica en nuestro país.

La sesión inaugural fue dedicada a recordar la memoria del profesor Elías Entralgo Herrero, y en ella se encontraban distintas autoridades de la Sociedad Cubana de Física, de las instituciones patrocinadoras, así como la Dra. Nuria García Menéndez, viuda del profesor Entralgo. A continuación les presentamos una versión de las palabras del profesor Rolando Pérez Álvarez, Jefe del Departamento de Física Teórica de la Universidad de La Habana.

Querida Nuria, estimados compañeros de la sección de Física Teórica y demás presentes.

Como comprenderán fácilmente, mi intención no es relatarles ni mucho menos valorar en toda su plenitud la fecunda vida de Elías. He seleccionado un par de aspectos centrales que en mi humilde opinión caracterizan el legado de nuestro destacadísimo colega y amigo. Es una nota necesariamente incompleta, sesgada e imperfecta sobre la vida de una persona de gran valía.

Lo que nos lleva a tener una valoración especial de Elías Entralgo, sin duda alguna, es que vivió sus 60 años de una manera coherente y dedicada, poniendo todo su talento, que era mucho, al servicio de nuestro país y de nuestra comunidad científica.

Elías fue uno de aquellos osados jóvenes que en los años 60 se desprendieron de familia y país para estudiar en la Unión Soviética, con más convicciones, esperanzas y fuerza de voluntad que certidumbres o seguridades.

A su regreso a Cuba formó parte del Claustro de la entonces Escuela de Física de la Universidad de La Habana. Fueron tiempos definitorios para nuestro futuro académico. Creo que no me aparto ni un ápice de la verdad si digo que los físicos que posteriormente nos formamos en estas aulas debemos a ese grupo de compañeros nuestros que estudiaron en la URSS una contribución importantísima a la primera versión de un Plan de Estudios que se

consolidó con el tiempo, pero que desde ese mismo momento tuvo la impronta de amplitud, rigor y profundidad por el que somos conocidos.

Hace apenas una semana la Carrera de Física de la Universidad de la Habana pasó con excelentes resultados la evaluación de los expertos la Junta Nacional de Acreditación recibiendo la categoría de Carrera de Excelencia. El actual Claustro se siente orgulloso por este resultado, pero es evidente que la semilla de esta cosecha se sembró en aquellos años 60. Se ha regado durante 40 años pero es justo reconocer el papel de aquellos pioneros. Elías tuvo un lugar destacado en la implementación de esas ideas al ocupar la subdirección docente y desempeñar él mismo en su calidad de profesor e investigador un papel significativo. Años más tarde Elías haría algo semejante en el Instituto Superior de Ciencias y Tecnologías Nucleares, centro reconocido por la formación de físicos de un alto nivel profesional, y donde despertó al igual que en la UH años antes, la admiración de estudiantes y profesores.

Durante sus muchos años en la Universidad de La Habana llegó a ser Director de su Dirección Docente Metodológica y un relevante profesor e investigador. Fue fundador del Grupo, hoy Departamento, de Física Teórica y uno de sus miembros prominentes.

Posteriormente pasó a trabajar en el área de Física Nuclear donde es recordado por sus varios años como subdirector del Centro Unificado de Investigaciones Nucleares de Dubna, y como docente e investigador del Instituto Superior de Ciencias y Tecnologías Nucleares, de donde era Profesor Titular al momento de su fallecimiento.

Es imposible hablar de los éxitos de la Facultad de Física de la Universidad de La Habana y del hoy Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas sin recordar las contribuciones de Elías Entralgo Herrero. Contribuciones hechas con una modestia notable y con un nivel de altruismo altísimo.

Las variadas responsabilidades de dirección no lo separaron nunca de una labor científica y docente tenaz y exitosa.

Las obras humanas se construyen con la participación de muchas personas, la mayor parte de las veces anónimas. Y los reconocimientos van a los que destacan por sus contribuciones, por su liderazgo en los procesos de construcción de grandes empresas. Elías fue uno de los líderes y contribuyentes descollantes en la ardua empresa de construcción de nuestra ciencia, la Física, en Cuba.

Las características fundamentales que hicieron de Elías esa persona particularmente querida y respetada era en primer lugar su ejemplo de esfuerzo, trabajo, abnegación; su compromiso nítido y sostenido con nuestro proyecto político; la claridad para ver que en la Ciencia está nuestro futuro, y que una docencia de calidad pedagógica y alto rigor científico es una contribución central de nuestro colectivo al desarrollo del país.

Junto a esas virtudes profesionales y políticas Elías tenía una calidad humana muy alta que lo hacía un compañero singular para que nos echase una mano en las más disímiles circunstancias. Al lado de convicciones muy claras en los principios y valentía para defender las ideas propias, Elías poseía una tolerancia admirable hacia la opinión ajena, y una disciplina a toda prueba a la hora de actuar de acuerdo al criterio colectivo.

Intelectual de gran talla y ser humano de gran estatura moral, Elías era cubanísimo de pies a cabeza, no sólo por lo jaranero y porque gustaba del buen ron, sino también, y es importante decirlo, por trabajar por esta patria y por este proyecto de una vida mejor con todas sus fuerzas y capacidades, inmerso en su tiempo e impulsor de los mejores valores de su época.

Son todas esas virtudes, esos ejemplos, los que hacen de Elías incluso después de su muerte un colega respetado y admirado, un compañero querido, un amigo entrañable.

Muchas gracias