

CALCULO DEL PROPAGADOR DE LA FUNCION DE ONDA QUE DESCRIBE EL COMPORTAMIENTO DE ELECTRONES DE BAJAS ENERGIAS EN UN CRISTAL HOMOGENEO, BASADO EN LA TEORIA DE INTEGRALES DE CAMINOS

Omar Rodriguez Pinilla, Fundación Universidad Central

RESUMEN

En muchos trabajos relacionados con el estudio de la cristalografía y sus diferentes métodos, la mayoría de ellos están centrados en el desarrollo de la teoría y caracterización de las bandas energéticas de los mismos, pero poco dedicados al cálculo de la función propagadora asociada a un haz de electrones de bajas energías. En el presente trabajo se hace el cálculo teórico del propagador de onda asociado a un haz de electrones incidente en un cristal homogéneo en diferentes direcciones cristalográficas.

ABSTRACT

Many works related to crystallography and its methods are centered in theory development and characterization of energetic bands but few are devoted to the calculation of the propagation function associated to a beam of low energy electrons. Present work does theoretical calculation of wave propagator associated to an electron beam arriving to an homogeneous crystal in different crystallographic directions.

El presente trabajo está dirigido al cálculo teórico del propagador de la función de onda que describe el comportamiento de un haz de electrones de bajas energías en los planos cristalográficos de un cristal homogéneo en condiciones de trayectorias semiclásicas.

Analizamos un cristal homogéneo, cuyos átomos efectúan además de oscilaciones térmicas, oscilaciones forzadas bajo la acción de una fuerza externa.

El Hamiltoniano de perturbación propio del cristal se puede expresar de la siguiente forma: [11]

$$\hat{H}' = \sum_{j,n} \hbar w_{j,n} \hat{X}_{j,n}^{-1} \hat{U}_{j,n} \quad (1)$$

donde: $\hat{U} \rightarrow$ operador de corrimiento de la posición de equilibrio de los átomos en la red unitaria;

$\hat{X}^{-1} \rightarrow$ operador de corrección por desplazamiento de la posición de equilibrio de los átomos en la red unitaria ocasionado por la fuerza externa.

Reemplazando: $\hat{X}_{j,n}^{-1} \hat{U}_{j,n} = \alpha_{j,n}$ como parámetro de deformación del cristal, entonces, se puede decir

que el cristal, dependiendo de su configuración cristalográfica, se deformará de manera distinta para cada dirección de movimiento en los canales del cristal.

Utilizando los operadores de creación y aniquilación de fonones,[17] el Hamiltoniano del cristal en el campo de perturbación será:

$$\hat{H}_1 = \sum_s \hbar w_s (a_s^+ a_s^- + 1/2) - \sum_s \hbar w_s (c_s^* a_s^+ + c_s a_s^-) \quad (2)$$

donde: $w_s (s = \vec{q}, \sigma) \rightarrow$ frecuencias normales de oscilación, correspondientes a la red σ asociada al vector \vec{q} .

El operador:

$$c_s = - \sum_{j,n,\alpha} K_{j,n}^\alpha(t) \frac{1}{w_s} \left(\frac{1}{2\mu \cdot \hbar \cdot w_s} \right)^{1/2} V_j^\alpha(s) \exp(i\vec{q}\vec{n}) \quad (3)$$

donde: $K_{j,n}^\alpha(t)$ - tensor de deformación elástica; μ - masa del cristal o de la celda unitaria; $\vec{q} \cdot \vec{n} = \vec{k} \cdot \vec{r}_n^-$; $V_j^\alpha(s)$ - amplitud de vibración del j -átomo de la red cero; $\alpha = 1, 2, 3$.

permite seleccionar una función propia del Hamiltoniano (2), tal que los valores propios del operador (valores energéticos) solo se vean afectados por un término de corrección energético, a los valores de un oscilador armónico cuántico, debido a esto, podemos escoger un operador unitario tal que, este cumpla con la siguiente condición :

$$\hat{U} = \exp \left(\sum \left(\zeta_s^* a_s^+ - \zeta_s a_s^- \right) \right) \quad (4)$$

y restringiendo a que $\zeta_s^* = \zeta_{-s}$ y además de que se cumpla que :

$$\begin{aligned} \hat{U}^+ a_s^- \hat{U} &= a_s^- + \zeta_s^* s \\ \hat{U}^+ a_s^+ \hat{U} &= a_s^+ + \zeta_s \end{aligned} \quad (5)$$

de las anteriores condiciones (3), (4) y (5) se obtiene:

$$\left\{ \sum \hbar w_s \left(a_s^+ a_s^- + 1/2 \right) + \hbar w_s |\zeta_s|^2 \right\} \varphi = E \varphi \quad (6)$$

donde: $\varphi = \hat{U}^+ \phi$. De la ecuación (6) se puede extraer el factor de corrección energético mencionado anteriormente y que corresponde al segundo término en la parte izquierda de la ecuación. Para el cristal esto representa un aumento en la energía vibracional debido al factor externo, representado por la fuerza externa o fuerza de deformación elástica, la cual se puede calcular de la siguiente forma :

$$\begin{aligned} \zeta_s \zeta_s^* = |\zeta_s|^2 &= \left| \frac{1}{w_s} \left(\frac{1}{2\mu \cdot \hbar \cdot w_s} \right)^{1/2} \sum_{j,n,\alpha} K_{j,n}^\alpha(t) V_j^\alpha(s) \right|^2 = \\ &= \frac{1}{w_s^2} \left(\frac{1}{2\mu \cdot \hbar \cdot w_s} \right) \left| \sum_{j,n,\alpha} K_{j,n}^\alpha(t) V_j^\alpha(s) \right|^2 = \\ &= \frac{1}{w_s^2} \left(\frac{1}{2\mu \cdot \hbar \cdot w_s} \right) \left| \sum_n F_n(t,s) \delta_{j,\alpha} \right|^2 \end{aligned} \quad (7)$$

donde: $F_n(t,s)$ - fuerza de deformación elástica;
 $\delta_{j,\alpha}$ - símbolo de Kronecker.

Incluyendo el Hamiltoniano de desviación de los electrones producido por la distribución de átomos en el cristal, que se puede representar como :

$$\hat{H}_0 = \frac{2\pi \cdot \hbar^2}{m} \sum_{j,n} a_{j,n} \delta(\vec{r} - \vec{R}_{j,n}) \quad (8)$$

donde: $a_{j,n}$ - longitud de desviación de Fermi;
 m - masa del electrón.

Antes de proceder a escribir el Hamiltoniano completo de interacción para el cristal, analicemos la siguiente acción :

$$\vec{k} \vec{R}_{j,n} = \vec{k} \vec{R}_{j,n}^0 + \sum_s \left(\Lambda_{s,j} a_s^- + \Lambda_{s,j}^* a_s^+ \right) \quad (9)$$

$$\text{donde: } \Lambda_{s,j} = \sum \left(\frac{\hbar}{2\mu^N w_s} \right)^{1/2} V_j^\alpha(s) A^\alpha \exp(i\vec{q}\vec{n});$$

μ^N - masa efectiva del cristal; a la vez que:
 $\Lambda_{s,j} = \Lambda_{s,j}^*$; $A^\alpha = (1/m^2)$ - parámetro de deformación de una cara de la celda unitaria, sobre la cual incide la onda electromagnética, u onda electrónica.

Debido a la anterior razón, debe existir un término que determine la presión ejercida por la onda electrónica al incidir sobre el cristal, este término resulta de la siguiente operación :

$$\begin{aligned} \Lambda_{s,j} \zeta_s^* &= \sum_{j,n,\alpha} (-1) \left(\frac{1}{2w_s^2 \mu^2} \right) \left| V_j^\alpha(s) \right|^2 A^\alpha K_{j,n}^{\alpha*}(t) \\ &= \sum_{j,n,\alpha} (-1) \left(\frac{1}{2w_s^2 \mu^2} \right) \left| V_j^\alpha(s) \right|^2 \frac{P_{j,n}^{\alpha*}(t)}{a_0} \end{aligned} \quad (10)$$

donde: a_0 - parámetro de red; $P_{j,n}^{\alpha*}(t)$ - tensor de presión de la onda electromagnética.

Ahora bien si; $V_j^\alpha(s) = V_j^\alpha \exp(i\vec{s}\vec{\rho}_j)$, la ecuación (10) incluirá un término denominado factor estructural de la red cristalográfica, cálculo realizado en [20], por eso :

$$\Lambda_{s,j} a_{s_s}^* = \sum_{j,n,\alpha} (-1) \left(\frac{1}{2w_s^2 \mu^{\frac{N+1}{2}}} \right) |S(s)|^2 |V_j^\alpha|^2 \frac{(2\pi \cdot \hbar)^3}{\Delta \cdot a_0} \quad (11)$$

$$No \sum_{\vec{\tau}} \delta(\vec{s} - 2\pi \cdot \vec{\tau}) P_{j,n}^{\alpha*}(t)$$

donde: Δ - volumen del cristal; No - densidad atómica en la red cristalográfica; $|S(s)|$ - factor estructural de red.

Con la ayuda de las ecuaciones asociadas a los Hamiltonianos de interacción (1), (2) y (8), podemos escribir entonces el Hamiltoniano completo de interacción y también evaluar el propagador de la función de onda de los electrones en el cristal, tomando como base las integrales de caminos de Feynman [12].

De la ecuación (9), especifiquemos la acción :

$$\Lambda_{s,j} a_s^-(t) = \sum_{\alpha} \left(\frac{\hbar}{2 \cdot \mu^N w_s} \right)^{\frac{1}{2}} V_j^\alpha(s) \quad (12)$$

$$A^\alpha \exp(i\vec{q}\vec{n}) \left[\left(\frac{\mu \cdot w_s}{2 \cdot \hbar} \right)^{\frac{1}{2}} \hat{X} + i \frac{\hat{P}}{(2 \cdot \mu \cdot \hbar \cdot w_s)^{\frac{1}{2}}} \right]$$

donde: $a_s^-(t)$ - operador de creación.

Después de las anteriores especificaciones, el Hamiltoniano completo de interacción del haz con la red cristalográfica será :

$$H = H_0 + H_1 + H^7 + \left(\frac{\hat{P}}{2 \cdot m} + \hat{V}(x) \right) \quad (13)$$

donde: $\hat{V}(x)$ - potencial periódico del cristal.

Cuando el Hamiltoniano de interacción no posee la forma ($\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}(x)$), entonces el propagador o función de Green tiene una forma más general :

$$G(x, t, x_0, t_0) = N \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \bar{D}_x \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} L(x) dt \right\} \quad (14)$$

donde: $N = \text{Lim}_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{i \cdot \hbar \cdot \tau} \right)^{\frac{n}{2}}$ - factor de fluctuación de la partícula de sus trayectorias semiclásicas ;

$\bar{D}_x = \prod_{j=1}^{n-1} d\vec{x}_j$; $L(x(t))$ - Lagrangiano de la partícula.

En la aproximación semiclásica :

$$\frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} L(x(t)) dt \cong \frac{i}{\hbar} \cdot \tau \cdot \sum_{j=0}^{n-1} (P_j \cdot \dot{q}_j - \hat{H}) \quad (15)$$

donde: P_j - j impulso y \dot{q}_j - j velocidad generalizada de la j partícula.

La ecuación (14) representa en términos generales el objetivo trazado en el presente trabajo y la cual puede ser objeto de simulación utilizando un método numérico adecuado para ello.

REFERENCIAS

1. AMATUNY, Z. A. (1984): "Modelación de cascadas electromagnéticas", Ereban.
2. BODNEV B. T. y otros (1988): "Principales fórmulas matemáticas", Minsk.
3. BORYSAGLEVSKII, L.A. (1988): "Mecánica Cuántica", Minsk.
4. BUDAK B. M. (1967): "Integrales cortas y series", Moscú.
5. GRADSHTEIN, I.S. e I.M. RYIK (1971): "Tablas de integrales, sumas, series y multiplicaciones", Moscú.
6. IANKE, E.; F. EDMA y F. LIOSH (1977): "Funciones especiales", Moscú.
7. LIUK, I.L. (1980): "Funciones matemáticas especiales y sus aproximaciones", Moscú.

8. MARTINIENKO, I. B. (1971): **Física del cuerpo sólido**, 13(4,9).
9. MATBEEV, N.M. (1974): "Métodos de integración de ecuaciones diferenciales", Minsk.
10. OZUKY E., X. (1985): "Interacción de partículas cargadas con los cuerpos sólidos", Moscú.
11. SAKURAI, J.J. (1985): "Modern Quantum Mechanics", Addison Wesley P.C.
12. SWANSON, M.S. (1992): "Path Integrals and Quantum Processes". Academic Press, Inc. Boston.
13. JOSEPH, I. and RICHARD WEBB (1989): "Interferencia cuántica y efecto Bohm-Aharonov". **Scientific American**. 6, junio.
14. TONOMURA, A. (1993): "Observation of flux lines by electron holography", **IEEE transactions on magnetics**, 29(6), november.
15. AITCHISON, E.J.R; N.E MARROMATOS ANYONS (1991): **Contemporary Phy.** 32(4), 219 - 333.
16. Landau L. D. *et al.* (1988): **Teoría de campos**, 2, Moscú.
17. _____ (1989): **Mecánica cuántica**, 3, Moscú.
18. CARPENTER, C.J. (1991): "Electromagnetic energy changes due to charges moving through, or zero, magnetic field". **IEE Proceedings - A**, 138(1), January.
19. PRESS, W.H., S.A. TEUKOLSKY y otros (1992): "Numerical recipes in fortran the art of Scientific Computing". University Press, Cambridge.
20. RODRÍGUEZ P., OMAR (1995): Notas del curso de mecánica cuántica avanzada realizado en la Universidad Nacional de Colombia.