

C. N. E. A. Biblioteca	
ARCHIVO PUBLICACIONES	
Nº 2	AÑO 1980

01.80.29

CNEA-NT-28/80

COMISION NACIONAL DE ENERGIA ATOMICA
DEPENDIENTE DE LA PRESIDENCIA DE LA NACION

GERENCIA DE DESARROLLO
Departamento de Materiales

USO DE PROPIEDADES DE SIMETRIA
EN EL CALCULO DE FUNCIONES DE GREEN
PARA REDES CUBICAS Y HEXAGONAL COMPACTA

N.Smetniansky - De Grande
y R.Migoni

Buenos Aires

1980

RESUMEN

La respuesta lineal de una red cristalina a fuerzas unitarias aplicadas en átomos del cristal es la función de Green. Esta puede ser obtenida a partir de los coeficientes de acoplamiento armónico entre átomos del cristal pasando por una transformación de Fourier a la red recíproca. El cálculo involucra una suma sobre puntos de la 1ª zona de Brillouin del cristal, suma que puede ser considerablemente reducida recurriendo a propiedades de simetría del cristal. Dicha reducción es descripta detalladamente en este trabajo para las redes cúbicas centrada en el cuerpo, centrada en las caras y hexagonal compacta. Se presentan además programas FORTRAN para cálculos de funciones de Green en las redes y en los métodos mencionados.

ABSTRACT

The linear response of a crystalline lattice to unit forces on lattice sites is the Green function. This can be obtained from the harmonic interatomic coupling coefficients through a Fourier transformation to the reciprocal lattice. The calculation involves a sum over points of the first Brillouin zone of the crystal. A drastic reduction of this sum can be achieved by taking into account symmetry properties of the lattice. Detailed descriptions of the reduction procedure for the face centered and body centered cubic and the hexagonal close packed lattices are given in this work. The developed methods are implemented in FORTRAN programs which are also explained.

INDICE

	Pág.
1. Función de Green. Descomposición de Fourier.	1
2. Reducción por simetría de la suma de Fourier.	6
3. Redes cúbicas primitivas.	9
3.1. Operaciones puntuales de simetría.	9
3.2. Parte irreducible de la zona de Brillouin.	11
3.3. Reducción de la suma de Fourier.	16
4. Red hexagonal compacta.	20
4.1. Red directa. Simetría.	20
4.2. Zona de Brillouin. Parte irreducible.	25
4.3. Simetría del tensor de Green y de su transformada de Fourier.	30
4.4. Reducción de la suma de Fourier.	33
5. Programas para cálculos de funciones de Green en redes cúbicas y hcp	43
Referencias	62

1. Función de Green - Descomposición de Fourier

El concepto de función de Green estática de una red cristalina y su utilidad en los cálculos de defectos puntuales es discutido en el artículo de revisión de Tewary ⁽¹⁾. En este capítulo nos limitaremos a reseñar los conceptos que utilizaremos, definiendo simultáneamente la notación. Detallaremos particularmente los pasos que llevan a expresar dicha función como una suma de Fourier extendida sobre la zona de Brillouin del cristal.

La energía potencial de una red cristalina distorsionada a causa de un defecto puntual puede ser desglosada de la siguiente manera:

$$\psi = \phi + V \quad (1.1)$$

donde ϕ es la energía de interacción entre los átomos de la red y V la energía de interacción entre dichos átomos y el defecto. No se considera la interacción directa entre defectos, lo cual se justifica cuando la concentración de éstos es baja.

Si se desarrolla ϕ a partir de las posiciones de equilibrio estático en la red perfecta se obtiene:

$$\psi = V + \phi_0 + \sum_{\alpha \ell \kappa} \phi_{\alpha}(\ell \kappa) u_{\alpha}(\ell \kappa) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\alpha \ell \kappa \\ \beta \ell' \kappa'}} \phi_{\alpha \beta}(\ell \kappa, \ell' \kappa') u_{\alpha}(\ell \kappa) u_{\beta}(\ell' \kappa') + \dots \quad (1.2)$$

$u_{\alpha}(\ell \kappa)$ es la componente cartesiana α del desplazamiento del átomo κ en la celda ℓ respecto de su posición de equilibrio en la red perfecta. Si hay m átomos por celda primitiva es

$\kappa = 1, \dots, m$. Con ℓ se resume una terna de enteros (ℓ_1, ℓ_2, ℓ_3) que define la posición de un nodo de la red como

$$\vec{r}_{\ell} = \ell_1 \vec{a}_1 + \ell_2 \vec{a}_2 + \ell_3 \vec{a}_3 \quad (1.3)$$

$$(1.3)$$

donde los \vec{a}_i son los vectores base de la red, los cuales conforman la celda primitiva. Las posiciones atómicas de equilibrio en el cristal perfecto están dadas por

$$\vec{r}(\ell\kappa) = \vec{r}_\ell + \vec{r}_\kappa \quad (1.4)$$

donde \vec{r}_κ define la posición de cada átomo en su celda.

Los coeficientes $\phi_\alpha(\ell\kappa)$, $\phi_{\alpha\beta}(\ell\kappa, \ell'\kappa')$, etc., son las derivadas sucesivas (1a, 2a, etc.) del potencial de la red, ϕ , respecto de la coordenadas cartesianas $r_\alpha(\ell\kappa)$ de los átomos en la configuración de equilibrio estático. Como ésta corresponde a un mínimo de ϕ , $\phi_\alpha(\ell\kappa) = 0$. Por esta razón los $u_\alpha(\ell\kappa)$ no tienen contribución de 1er. orden en la Ec. (1.2). Además, los términos de orden superior al 2º son despreciados, con lo que se hace lo que se denomina la aproximación armónica.

La configuración de equilibrio de la red con el defecto se obtiene minimizando ψ respecto de \vec{u} :

$$\frac{\partial \psi}{\partial u_\alpha(\ell\kappa)} = 0 = \frac{\partial V(\vec{r} + \vec{u})}{\partial u_\alpha(\ell\kappa)} + \sum_{\beta \ell' \kappa'} \phi_{\alpha\beta}(\ell\kappa, \ell' \kappa') u_\beta(\ell' \kappa') \quad (1.5)$$

Aquí \vec{r} representa el conjunto de posiciones $\vec{r}(\ell\kappa)$ de red perfecta y \vec{u} el conjunto de desplazamientos. Se trata de determinar éstos de modo que se satisfagan estas relaciones.

El primer término de (1.5) representa las fuerzas ejercidas por el defecto sobre los átomos de la red en sus posiciones en la red distorsionada :

$$f_{\alpha}(\ell\kappa) = - \frac{\partial V(\vec{r}+\vec{u})}{\partial u_{\alpha}(\ell\kappa)} \quad (1.6)$$

En cristales no iónicos estas fuerzas son de corto alcance. Aún así, el campo de desplazamientos inducidos a través del potencial de interacción de la red se extiende a grandes distancias del defecto. Un método para hallar las distorsiones, que evita resolver el sistema (1.5) para un número muy grande de variables, es el de la función de Green de la red. Esta se define como la inversa de la matriz de constantes de fuerza

$$\phi_{\alpha\beta}(\ell\kappa, \ell'\kappa') :$$

$$\underline{g} = \underline{\phi}^{-1} \quad (1.7)$$

Esta inversión, sin embargo, no es practicable directamente, ya que la dimensión de $\underline{\phi}$ está fijada por la extensión del campo de distorsiones. Por ello es conveniente transformar la relación

$$f_{\alpha}(\ell\kappa) = \sum_{\beta\ell'\kappa'} \phi_{\alpha\beta}(\ell\kappa, \ell'\kappa') u_{\beta}(\ell'\kappa') \quad (1.8)$$

al espacio recíproco. Se supone que el campo de desplazamientos es periódico, imponiéndose así las condiciones de borde. Para que éstas no afecten significativamente el campo de desplazamientos en la vecindad del defecto, se toma un volumen de definición suficientemente grande. Las condiciones de contorno periódicas consideradas, o de Born - von Karman, son ampliamente usadas en dinámica de redes perfectas (2).

Con estas suposiciones puede escribirse:

$$u_{\beta}(\ell'\kappa') = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}'} U_{\beta}(\kappa'\vec{q}') e^{i\vec{q}' \cdot \vec{r}(\ell'\kappa')} \quad (1.9)$$

donde los \vec{q}' están uniformemente distribuidos en la 1ª zona de Brillouin (ZB), siendo N su número total. N coincide con el número de celdas primitivas en el volumen del espacio directo anteriormente mencionado, al que denominaremos supercelda periódica.

Reemplazando (1.9) en (1.8), operando luego sobre ambos miembros de (1.9) con $e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}(\ell\kappa)}$, y teniendo en cuenta además que (2)

$$\frac{1}{N} \sum_{\ell} e^{i(\vec{q}' - \vec{q}) \cdot \vec{r}(\ell\kappa)} = \delta_{\vec{q}, \vec{q}'} \quad (1.10)$$

resulta

$$F_{\alpha}(\kappa, \vec{q}) = \sum_{\beta\kappa'} \Phi_{\alpha\beta}(\kappa\kappa', \vec{q}) U_{\beta}(\kappa', \vec{q}) \quad (1.11)$$

donde se llama

$$F_{\alpha}(\kappa, \vec{q}) = \sum_{\ell} f_{\alpha}(\ell\kappa) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}(\ell\kappa)} \quad (1.12)$$

$$\Phi_{\alpha\beta}(\kappa\kappa', \vec{q}) = \sum_{\ell} \phi_{\alpha\beta}(\ell\kappa, 0\kappa') e^{-i\vec{q} \cdot \{\vec{r}(\ell\kappa) - \vec{r}(0\kappa')\}} \quad (1.13)$$

La Ec (1.11) es la equivalente, en el espacio recíproco, de la (1.8). Los $\Phi_{\alpha\beta}(\kappa\kappa', \vec{q})$ constituyen una matriz $\underline{\Phi}(\vec{q})$ de dimensión $3m \times 3m$, fácilmente invertible.

Llamando

$$\underline{G}(\vec{q}) = \underline{\Phi}^{-1}(\vec{q}) \quad (1.14)$$

de la Ec (1.11) se obtiene

$$U_{\alpha}(\kappa, q) = \sum_{\beta \kappa'} G_{\alpha\beta}(\kappa\kappa', \vec{q}) F_{\beta}(\kappa', \vec{q}) \quad (1.15)$$

Si en (1.9) se expresan las amplitudes $\vec{U}(\vec{q})$ según (1.15), con $\vec{F}(\vec{q})$ dado por (1.12), se obtiene la relación

$$u_{\alpha}(\ell\kappa) = \sum_{\ell'\kappa'\beta} \left\{ \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} G_{\alpha\beta}(\kappa\kappa', \vec{q}) e^{i\vec{q} \cdot [\vec{r}(\ell\kappa) - \vec{r}(\ell'\kappa')]} \right\} f_{\beta}(\ell'\kappa') \quad (1.16)$$

de la cual resulta obvio que la expresión de la función de Green estática de la red con condiciones de contorno periódicas es :

$$g_{\alpha\beta}(\ell\kappa, \ell'\kappa') = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} G_{\alpha\beta}(\kappa\kappa', \vec{q}) e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}(\ell\kappa, \ell'\kappa')} \quad (1.17)$$

donde usamos la abreviatura :

$$\vec{r}(\ell\kappa, \ell'\kappa') = \vec{r}(\ell\kappa) - \vec{r}(\ell'\kappa') \quad (1.18)$$

Resumiendo, los pasos a seguir para calcular la función de Green son :

a) Calcular la transformada en el espacio recíproco, $\underline{\Phi}(\vec{q})$, de la matriz de ctes de fuerzas $\underline{\Phi}$, según (1.13).

Este cálculo no ofrece dificultades en el caso de interacciones de corto alcance. Los $\phi_{\alpha\beta}(\ell\kappa, 0\kappa')$ se anulan para átomos ($\ell\kappa$) ubicados más allá de una distancia relativamente chica del átomo ($0\kappa'$).

b) Calcular la inversa de $\underline{\Phi}(\vec{q})$, Ec. (1.14).

c) Se repiten los pasos a) y b) para cada \vec{q} de la ZB y se suma cada resultado a los anteriores para obtener finalmente la suma planteada en (1.17). Esta suma puede ser limitada a una fracción reducida de la ZB aprovechando las propiedades de simetría del cristal, como se verá en la próxima sección.

2. Reducción por simetría de la suma de Fourier

Cada punto \vec{q} en la sumatoria de la ecuación (1.16) tiene un cierto número de puntos equivalentes en la ZB, que se relacionan con él por operaciones de simetría que conservan invariante el cristal. Por lo tanto, las expresiones de la función de Green en estos puntos equivalentes, estarán relacionadas entre sí por esas mismas operaciones de simetría. Esto permite limitar la sumatoria a un poliedro elemental irreducible de la ZB, tal que aplicando operaciones de simetría sobre cada uno de sus puntos se obtienen todos sus equivalentes en la ZB.

Repitiendo esta operación para todos los puntos del poliedro se genera toda la ZB.

Consideremos únicamente puntos \vec{q} pertenecientes a uno de los poliedros irreducibles, al que llamaremos P. Los puntos en el resto de la ZB equivalentes a uno dado de P se obtienen en la forma $\underline{S}\vec{q}$, donde las \underline{S} son matrices de 3x3 que representan las distintas operaciones de simetría.

La (1.16) puede pues reescribirse de la siguiente manera :

$$g_{\alpha\beta}(\ell\kappa, \ell'\kappa') = \frac{1}{N} \sum_{q \in P} \frac{1}{h_q} \sum_{\underline{S}} G_{\alpha\beta}(\kappa\kappa', \underline{S}\vec{q}) e^{i\underline{S}\vec{q} \cdot \vec{r}(\ell\kappa, \ell'\kappa')} \quad (2.1)$$

Aquí está tenido en cuenta el hecho de que los puntos del contorno de P, los cuales son puntos de simetría de la ZB, permanecen invariantes ante cierto número h_q de operaciones de simetría, que constituyen el denominado "grupo de q". Uno de esos puntos frontera, y cualquiera de sus equivalentes en el resto de la ZB, se repetirá h_q veces al aplicar la totalidad de las operaciones de simetría. Por lo tanto la suma sobre S debe ser dividida por h_q . Para un punto interior de P es $h_q = 1$. Para un punto frontera, h_q es el número de poliedros irreducibles que comparten dicho punto, incluyendo en la cuenta poliedros que pertenezcan a zonas de Brillouin vecinas.

Para expresar $G_{\alpha\beta}(\kappa\kappa', \underline{S}\vec{q})$ en función de $G_{\alpha\beta}(\kappa\kappa', \vec{q})$ nótese que la matriz $\underline{G}(\vec{q})$ está sujeta a las mismas leyes de transformación que su inversa $\underline{\Phi}(\vec{q})$. Si para ésta vale ⁽³⁾ :

$$\underline{\Phi}(\underline{S}\vec{q}) = \underline{\sigma}(S) \underline{\Phi}(\vec{q}) \underline{\sigma}^+(S) \quad (2.2.)$$

donde $\sigma(S)$ es una transformación unitaria, es decir, $\sigma^{-1} = \sigma^+$ (σ^+ = transpuesta conjugada de σ), entonces

$$\begin{aligned} \underline{G}(\underline{S}\vec{q}) &= |\underline{\sigma}^+(S)|^{-1} \underline{\Phi}^{-1}(\vec{q}) \underline{\sigma}^{-1}(S) \\ &= \underline{\sigma}(S) \underline{G}(\vec{q}) \underline{\sigma}^+(S) \end{aligned} \quad (2.3.)$$

En Ref. 3 se halla la expresión de la transformación para la siguiente matriz dinámica :

$$D_{\alpha\beta}(\kappa\kappa', \vec{q}) = \frac{1}{\sqrt{m_\kappa m_{\kappa'}}} \Phi_{\alpha\beta}(\kappa\kappa', \vec{q}) e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r}_\kappa - \vec{r}_{\kappa'})} \quad (2.4)$$

De dicha expresión resulta la siguiente matriz de transformación para $\underline{\Phi}(\vec{q})$ y $\underline{G}(\vec{q})$:

$$\sigma_{\alpha\beta}(\kappa\kappa', S) = S_{\alpha\beta} \delta_{\kappa, \mathfrak{J}(\kappa')} e^{-i\underline{S}\vec{q} \cdot \vec{v}_S} \quad (2.5.)$$

donde $\mathfrak{J}(\kappa')$ es una función indicativa del sitio al cual se traslada, por efecto de la operación S , un átomo que inicialmente ocupa el sitio κ' . \vec{v}_S es una translación no primitiva del cristal asociada a la operación puntual S . La expresión (2.5) vale en el caso más general de un cristal con grupo de simetría no simmórfico, en el cual ciertas operaciones puntuales de simetría deben ir acompañadas de una translación no primitiva para que el cristal permanezca invariante. Además mediante la función $\mathfrak{J}(\kappa)$ se toma en consideración la posibilidad de que, aún tratándose de un grupo cristalino simmórfico ($\vec{v}_S = 0$), ciertas operaciones de simetría produzcan intercambios de subredes (*). Obviamente los sitios κ y $\mathfrak{J}(\kappa)$ deben estar ocupados por átomos iguales.

Precisamente la estructura cristalina hexagonal compacta (hcp) tiene un grupo de simetría no simmórfico donde además algunas operaciones (no necesariamente las que llevan asociada una translación \vec{v}_S) involucran un intercambio de las dos subredes.

Ahora bien, la exponencial imaginaria que contiene a \vec{v}_S en (2.5) desaparece al aplicar la transformación de acuerdo a (2.3) para obtener $\underline{G}(\underline{S}\vec{q})$. Por lo tanto en lugar de ésta se usará :

$$\underline{G}(\underline{S}\vec{q}) = \underline{I}(S) \underline{G}(\vec{q}) \underline{I}^+(S) \quad (2.6)$$

(*) El cristal está formado por un conjunto de subredes de igual estructura, interpenetradas. Cada sitio κ en una celda pertenece a una subred distinta, a la cual identifica.

con

$$T_{\alpha\beta}(\kappa\kappa', S) = S_{\alpha\beta} \delta_{\kappa, \mathfrak{S}(\kappa')} \quad (2.7)$$

$\underline{T}(\underline{S})$ es una matriz real, por lo cual $^+$ implica únicamente una transposición.

De acuerdo a (2.6) y (2.7), a los efectos de los cálculos descriptos en este trabajo no tiene relevancia si la operación S involucra o no una translación no primitiva del cristal.

3. Redes cúbicas primitivas

En este capítulo se aplicará el método desarrollado en el Cap.2 a dos de las redes primitivas cúbicas, la centrada en las caras (fcc) y la centrada en el cuerpo (bcc). Hay una gran variedad de metales con estas estructuras. El análisis es igualmente válido para la red cúbica simple (sc) ya que las tres redes cúbicas primitivas poseen el mismo grupo puntual O_h , con los 48 elementos de simetría que tiene un cubo.

3.1. Operaciones puntuales de simetría

Considérese un sistema coordenado cartesiano con origen en el centro de un cubo cuyas caras son paralelas a los planos coordenados. En la Fig.1 se muestra el octante de coordenadas positivas de este cubo.

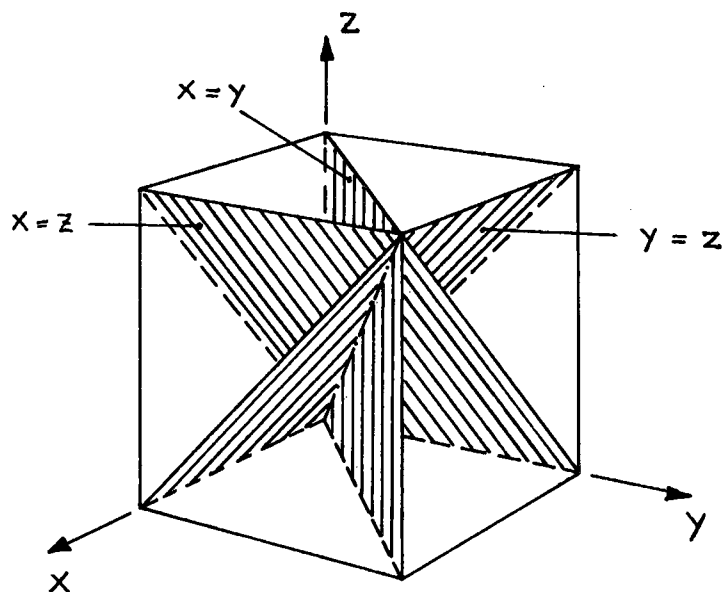


Figura 1

Un punto del cubo en este octante, de coordenadas (x,y,z) , es equivalente a cualquier punto que se obtenga de éste por cambios de signo y/o intercambio de coordenadas. Los primeros corresponden a reflexiones en los planos coordenados. De estas reflexiones consideraremos, incluyendo la operación identidad, las siguientes:

$$(x,y,z) \rightarrow \left\{ \begin{array}{l} (x, y, z) \\ (-x, y, z) \\ (x, -y, z) \\ (x, y, -z) \end{array} \right. \quad (3.1)$$

Los intercambios de coordenadas, más la identidad, son:

$$(x, y, z) \rightarrow \begin{cases} (x, y, z) \\ (x, z, y) \\ (y, z, x) \\ (y, x, z) \\ (z, x, y) \\ (z, y, x) \end{cases} \quad (3.2)$$

Estas corresponden a reflexiones en los planos $x = y$, $y = z$ y $z = x$, los cuales dividen el octante positivo del cubo en 6 tetraedros equivalentes, como se ve en la Fig.1. Mediante (3.2) se obtienen los puntos equivalentes de estos tetraedros. Combinando estas 6 operaciones con las 4 de (3.1) tenemos 24 operaciones. Cada una de ellas, combinadas con la inversión, $(x,y,z) \rightarrow (-x,-y,-z)$, resulta en un total de 48 operaciones.

Por tratarse de redes primitivas, el tensor de Green en el espacio recíproco se reduce a una matriz de 3×3 , $G_{\alpha\beta}(\vec{q})$, con componentes cartesianas únicamente. Esas componentes cartesianas se transforman como la diádica $x_{\alpha}x_{\beta}$. Por ejemplo, por efecto de la operación $(x,y,z) \rightarrow (-x, z, -y)$ resulta $G_{xy} \rightarrow -G_{xz}$, $G_{xz} \rightarrow G_{xy}$, $G_{yz} \rightarrow -G_{zy}$, etc. Si \underline{S} es la matriz correspondiente a dicha operación, esto quiere decir que $G_{xy}(\underline{S}\vec{q}) = -G_{xz}(\vec{q})$, etc. Así se evita realizar operaciones matriciales para hallar $\underline{G}(\underline{S}\vec{q})$.

3.2 Parte irreducible de la zona de Brillouin

En las figuras 2 y 3 se representan las zonas de Brillouin de las redes fcc y bcc respectivamente⁽⁴⁾.

Dividiendo el octante positivo en estas figuras mediante planos $x = y$, $y = z$ y $z = x$, como se ha hecho en la Fig.1, resultan 6 poliedros irreducibles como el $\Gamma X W K L U$, en la Fig.2, y el $\Gamma H N P$, en la Fig.3. Llamaremos P al poliedro dibujado en cada caso.

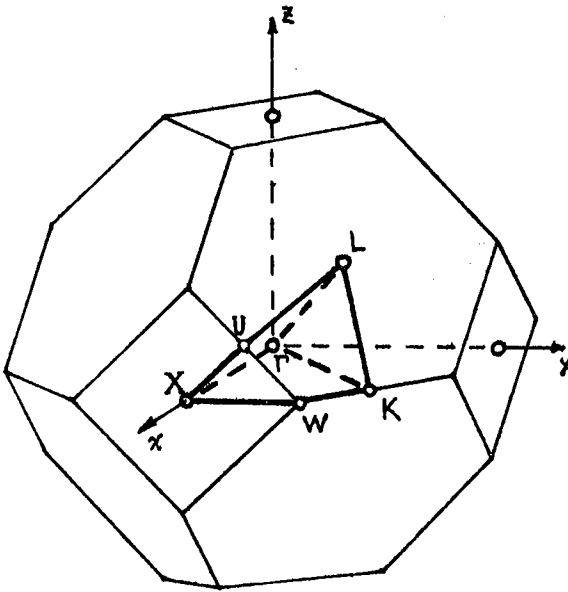


Figura 2 :Zona de Brillouin de la red fcc

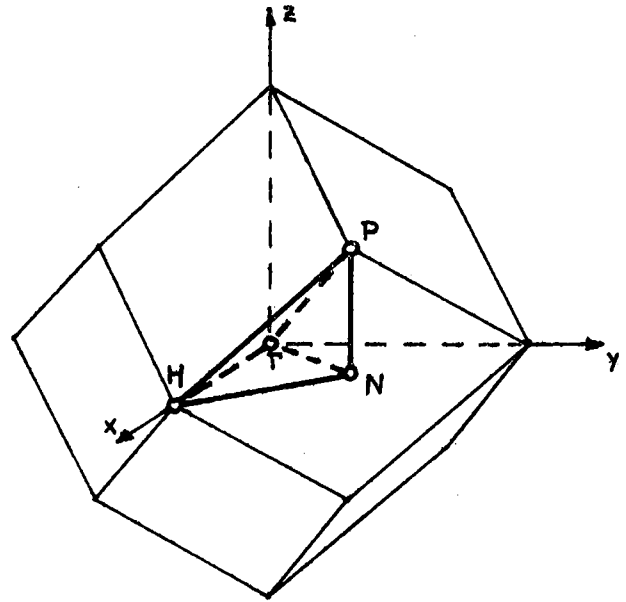


Figura 3 : Zona de Brillouin de la red bcc

Los vectores \vec{q} definidos en la Ec.(1.9) pueden ser escritos en el sistema cartesiano como:

$$\vec{q} = \frac{2\pi}{La} (i, j, k) \quad (3.3)$$

donde a es el parámetro de la red cúbica y L es un entero que determina las dimensiones de la supercelda periódica. Los enteros (i, j, k) deberán satisfacer ciertas relaciones entre sí y con L para que \vec{q} pertenezca a P . La limitación impuesta por los planos $x = y$, $y = z$ y $z = 0$ se expresa como:

$$i \geq j \geq k \geq 0 \quad (3.4)$$

Esto es válido para ambas redes fcc y bcc. Las restantes limitaciones a los q , impuestas por la superficie de la ZB, son distintas

para cada red. En la ZB de la red fcc (Fig.2) la ecuación correspondiente a la cara perpendicular al eje x es $i = 1$. Sobre la cara perpendicular a la dirección $[1\ 1\ 1]$ se tiene $i + j + k = 3L/2$ (Ver Ref.4). Por consiguiente, a las condiciones (3.4) debe añadirse, para la red fcc,

$$i \leq L ; \quad i + j + k \leq \frac{3}{2} L \quad (3.5)$$

En el caso de la red bcc (Fig.3), el poliedro P tiene sólo una cara coincidente con la superficie de la ZB. Su ecuación es $i + j = L$ (Ver Ref.4). Entonces, para la red bcc, a (3.4) debe añadirse la condición:

$$i + j \leq L \quad (3.6)$$

Las condiciones (3.4) y (3.5), válidas para una red fcc, se pueden reformular de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} 0 &\leq i \leq L \\ 0 &\leq j \leq \min(i, 3L/2 - i) \\ 0 &\leq k \leq \min(j, 3L/2 - i - j) \end{aligned} \quad (3.7)$$

Para la red bcc, de las (3.4) y (3.6) se obtiene:

$$\begin{aligned} 0 &\leq i \leq L \\ 0 &\leq j \leq \min(i, L - i) \\ 0 &\leq k \leq j \end{aligned} \quad (3.8)$$

Las desigualdades (3.7), o las (3.8), permiten fijar en forma sucesiva los rangos de valores para los enteros i, j, k . Por eso resultan convenientes para programar numéricamente.

La red recíproca de la fcc es bcc y viceversa. Seleccionando convenientemente los valores de i, j y k se obtiene una red de puntos \vec{q} del mismo tipo que la red recíproca. Entonces los planos límites del poliedro P son planos de puntos \vec{q} . El número de inter -

Punto		Grupo	h_q	$0 \leq k \leq j \leq i \leq L$	$i + j + k \leq \frac{3}{2} L$	$j : L$
interior		C_1	1			
Caras	$\hat{U}\hat{L}\hat{K}$	C_1	1		=	\neq
		C_2	2		=	=
	$\hat{U}\hat{X}\hat{W}$	C_{1h}	2		=	
	$\hat{L}\hat{F}\hat{K}$				=	
	$\hat{L}\hat{F}\hat{X}$				=	
$\hat{X}\hat{F}\hat{K}$				=		
Aristas	$\overline{W}\hat{K}$	C_{1h}	2		=	
	$\overline{W}\hat{U}$				=	
	$\overline{L}\hat{K}$				=	
	$\overline{L}\hat{U}$				=	
	$\overline{X}\hat{U}$	C_{2v}	4		=	
	$\overline{X}\hat{W}$				=	
	$\overline{F}\hat{K}$				=	
	$\overline{F}\hat{L}$	C_{3v}	6		=	
	$\overline{F}\hat{X}$	C_{4v}	8		=	
Vértices	K	C_{2v}	4		=	
	U				=	
	W	D_{2d}	8		=	
	L	D_{3d}	12		=	
	X	D_{4h}	16		=	
	Γ	O_h	48		=	

Tabla 1: Características de los puntos pertenecientes a la parte irreducible de la ZB de la red fcc. En el encabezamiento de la tabla se dan las condiciones que satisfacen todos esos puntos $\vec{q} = (2\pi/L\alpha)(i,j,k)$ (coordenadas cartesianas) y en cada caso se indica con = si se satisface la igualdad. La relación entre j y $L/2$ interesa sólo para puntos en la cara $\hat{U}\hat{L}\hat{K}$, donde la igualdad vale sobre la línea $\overline{L}\hat{W}$.

Punto		Grupo	h_q	$0 \leq k \leq j \leq i$	$j \leq L - i$
interior		C_1	1		
caras	$\overset{\Delta}{H}\overset{\Delta}{\Gamma}N$	C_{1h}	2	=	
	$\overset{\Delta}{H}\overset{\Delta}{\Gamma}P$			=	
	$\overset{\Delta}{N}\overset{\Delta}{P}\overset{\Delta}{\Gamma}$			=	
	$\overset{\Delta}{N}P\overset{\Delta}{H}$			=	
aristas	$\overline{\Gamma}N$	C_{2v}	4	=	=
	\overline{NP}			=	=
	\overline{NH}			=	=
	$\overline{\Gamma}P$	C_{3v}	6	=	=
	\overline{HP}			=	=
	$\overline{\Gamma}H$	C_{4v}	8	=	=
vértices	N	D_{2h}	8	=	=
	P	T_d	24	=	=
	H Γ	O_h	48	= = =	=

Tabla 2 : Características de los puntos \vec{q} pertenecientes a la parte irreducible de la ZB de una red bcc, con $\vec{q} = (2\pi/La)(i, j, k)$ (coordenadas cartesianas).

valos en que resulta subdividido el eje x desde el centro hasta el borde de la zona de Brillouin es L. Para que el conjunto de los puntos \vec{q} incluya todos los vértices del poliedro P hay que dar un valor par a L, según se puede ver al analizar (3.7) y (3.8).

En las tablas 1 y 2, correspondientes a las redes fcc y bcc, los puntos de P están clasificados según sus grupos de simetría. Se dan los órdenes de dichos grupos, h_q , que se utilizan para evaluar (2.1), y las condiciones que cumplen las coordenadas (i,j,k) para cada conjunto de puntos.

3.3. Reducción de la suma de Fourier

Como en las redes cúbicas primitivas hay un único átomo por celda elemental, podemos descartar los índices de sitio, κ y κ' , en la ecuación (2.1).

Por otro lado, la operación de inversión no afecta en estos cristales a la función de Green, es decir $G_{\alpha\beta}(-\vec{q}) = G_{\alpha\beta}(\vec{q})$. Como a cada término de (2.1), con \underline{S} correspondiente a (3.1) y (3.2), se les suma un término con $-\underline{S}$, resultante de combinar la inversión con las operaciones \underline{S} , la ecuación (2.1) puede escribirse así:

$$g_{\alpha\beta}(\vec{r}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q} \in P} \frac{2}{h_q} \sum_{\underline{S}}^{24} G_{\alpha\beta}(\underline{S}\vec{q}) \cos(\underline{S}\vec{q} \cdot \vec{r}) \quad (3.9)$$

donde \vec{r} es un vector de la red directa y la suma sobre \underline{S} se limita a las 24 operaciones que resultan de combinar (3.1) con (3.2). Estas operaciones al actuar sobre \vec{q} dado por (3.3) producen sólo intercambios y/o cambios de signo de los enteros (i,j,k). Llamemos (i_s, j_s, k_s) a la terna así obtenida. Además $G_{\alpha\beta}(\underline{S}\vec{q}) = G_{\alpha_s\beta_s}(\vec{q})$, donde $\alpha_s \beta_s$ resulta de $\alpha\beta$ al aplicar \underline{S} según (3.1) y (3.2).

Expresemos los vectores \vec{r} en unidades del parámetro de red a (lado de la celda cúbica) :

$$\vec{r} = a (r_x, r_y, r_z) \quad (3.10)$$

Cada término de la suma sobre \underline{S} en (3.9) tiene entonces la forma :

$$G_{\alpha_s \beta_s}^{(ijk)} c_{i_s j_s k_s} \quad (3.11)$$

donde empleamos la notación :

$$c_{ijk} = \cos \frac{2\pi}{L} (i r_x + j r_y + k r_z) \quad (3.12)$$

Usaremos también la siguiente notación :

$$\begin{aligned} c_i^\alpha &= \cos \left(\frac{2\pi}{L} i r_\alpha \right) \\ s_i^\alpha &= \text{sen} \left(\frac{2\pi}{L} i r_\alpha \right) \end{aligned} \quad (3.13)$$

Consideremos en primer lugar las 4 operaciones (3.1). Al sumar los 4 términos correspondientes de la forma (3.11), y empleando relaciones trigonométricas resulta, para las componentes diagonales de $g_{\alpha\beta}(\vec{r})$:

$$G_{\alpha\alpha}(ijk)(c_{ijk} + c_{\bar{i}jk} + c_{i\bar{j}k} + c_{ij\bar{k}}) = 4 G_{\alpha\alpha}(ijk) c_i^x c_j^y c_k^z \quad (3.14)$$

El guión sobre los subíndices (i,j,k) indica cambio de signo.

La contribución de las mismas 4 operaciones a $g_{xy}(\vec{r})$ es :

$$\begin{aligned} &G_{xy}(ijk)(c_{ijk} - c_{\bar{i}jk} - c_{i\bar{j}k} + c_{ij\bar{k}}) \\ &= 4 G_{xy}(ijk) s_i^x s_j^y c_k^z \end{aligned} \quad (3.15)$$

Análogamente, las contribuciones a $g_{xz}(\vec{r})$ y $g_{yz}(\vec{r})$ son :

$$4 G_{xz}(ijk) s_i^x c_j^y s_k^z \quad (3.16)$$

$$y \quad 4 \quad G_{yz} \quad (ijk) \quad c_i^x \quad s_j^y \quad s_k^z \quad (3.17)$$

respectivamente.

Como vemos en (3.14) a (3.17), la suma sobre las 4 operaciones representadas en (3.1) conduce a un único término en cada caso. Sumando los términos que se generan a partir de éste por aplicación de las 6 operaciones (3.2) obtenemos la suma sobre 24 operaciones planteada en (3.9). Resulta entonces :

$$g_{\alpha\beta}(\vec{r}) = \frac{8}{N} \sum_{ijk}^{(P)} \frac{1}{h_{ijk}} \sum_S^6 G_{\alpha_s \beta_s} (ijk) H_{\alpha\beta} (i_s \ j_s \ k_s ; \vec{r}) \quad (3.18)$$

donde $H_{\alpha\beta}$ es el producto de tres funciones trigonométricas que corresponde a $\alpha\beta$, según (3.14) a (3.17). La suma sobre (ijk) se limita al poliedro P y la suma sobre S a las 6 operaciones (3.2). Los $(i_s \ j_s \ k_s)$ son las permutaciones de (ijk) correspondientes a estas operaciones. Emplearemos un índice J para numerar dichas permutaciones en el mismo orden en que aparecen en (3.2), es decir:

J	1	2	3	4	5	6	(3.19)
$i_s \ j_s \ k_s$	ijk	ikj	jki	jik	kij	kji	

Además usaremos la notación de Voigt para sustituir los pares de índices cartesianos $\alpha\beta$ por un índice ν :

ν	1	2	3	4	5	6	(3.20)
$\alpha\beta$	xx	yy	zz	yz	xz	xy	

\ J	1	2	3	4	5	6
\ \nu	1	2	3	4	5	6
1	1	1	2	2	3	3
2	2	3	3	1	1	2
3	3	2	1	3	2	1
4	4	4	5	5	6	6
5	5	5	6	4	4	5
6	6	6	4	6	5	4

$$\mu(\nu, J)$$

Tabla 3

Con estas convenciones la (3.18) adquiere la siguiente forma :

$$g_{\nu}(\vec{r}) = \frac{8}{N} \sum_{ijk}^{(P)} \frac{1}{h_{ijk}} \sum_{J=1}^6 G_{\mu(\nu, J)}(ijk) H_{\nu}(J; \vec{r}) \quad (3.21)$$

donde las $H_{\nu}(J; \vec{r})$ están definidas, para $J = 1$, por :

\ \nu	1, 2, 3	4	5	6
H_{\nu}(1; \vec{r})	$c_i^x c_j^y c_k^z$	$-c_i^x s_j^y s_k^z$	$-s_i^x c_j^y s_k^z$	$-s_i^x s_j^y c_k^z$

$$(3.22)$$

Las funciones correspondientes a los demás valores de J se obtienen sustituyendo las correspondientes permutaciones de (ijk), según (3.19). La expresión (3.21) de la función de Green es muy conveniente para programar.

Sólo se calculan 6 componentes del tensor de Green, ya que éste es simétrico.

4. Red hexagonal compacta

4.1. Red directa - Simetría

Una red hexagonal se caracteriza por tener un único eje de rotación de 60° , el eje hexagonal.

La estructura hexagonal compacta (hcp) está compuesta por dos subredes hexagonales simples interpenetradas como muestra la Fig.4. En esta figura las dos subredes, que designaremos por 1 y 2, están identificadas por círculos negros y blancos respectivamente. Los átomos de ambas subredes son iguales. Los planos atómicos normales al eje hexagonal, o planos basales, pertenecen alternadamente a las subredes 1 y 2. La distancia entre dos planos sucesivos es $c/2$ siendo c el parámetro de red en la dirección del eje hexagonal, que coincide con z .

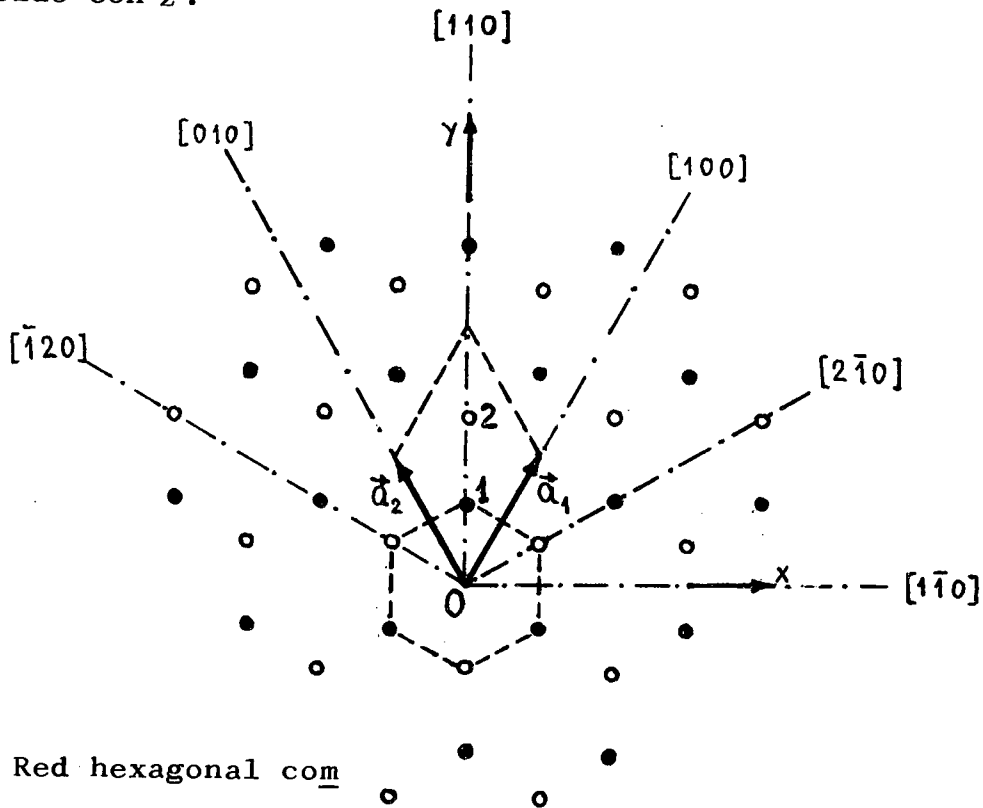


Figura 4: Red hexagonal compacta vista en la dirección del eje hexagonal.

La celda primitiva es un paralelepípedo recto cuya base rómbica, con un ángulo de 60° , se muestra en la Fig. 4, Como lados de la celda tenemos los vectores \vec{a}_1 y \vec{a}_2 , de módulo a , y un tercer vector \vec{a}_3 , de modulo c , normal a los anteriores. Esos tres vectores forman una base hexagonal de la red. Además elegimos un sistema cartesiano como se indica en la Fig.4. El punto 0, origen de coordenadas y de la celda, equidista de dos planos basales. Se puede ver que la red es invariante ante una inversión respecto del punto 0, con la peculiaridad de que las subredes 1 y 2 resultan intercambiadas al realizar dicha operación.

En la Fig. 5 se tiene una perspectiva de la celda primitiva. Allí se indican, en la base hexagonal y respecto del origen de la celda, las posiciones de los dos átomos que forman la base del cristal.

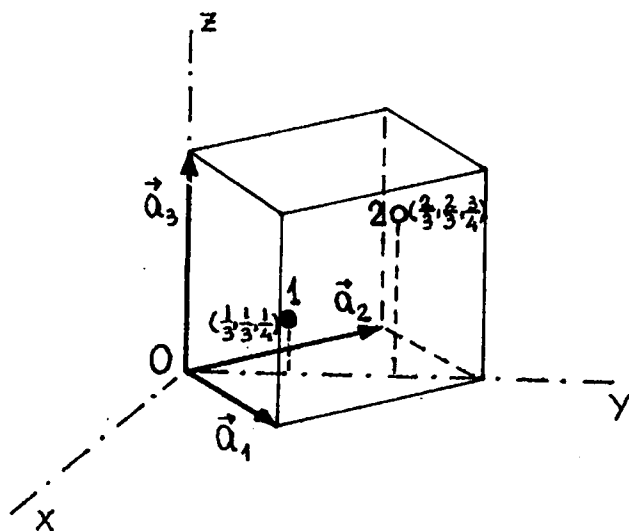


Fig. 5: Celda primitiva de la red hcp

Con los valores allí indicados y las definiciones (1.3) y (1.4) el vector posición de un átomo en un sitio x (1 o 2) de una celda l está dado por :

$$\vec{r}(\kappa) = \left(l_1 + \frac{\kappa}{3}\right) \vec{a}_1 + \left(l_2 + \frac{\kappa}{3}\right) \vec{a}_2 + \left[l_3 + \frac{1}{4}(2\kappa - 1)\right] \vec{a}_3 \quad (4.1)$$

De las figuras 4 o 5 se deducen las siguientes expresiones de los vectores de la base hexagonal en coordenadas cartesianas :

$$\begin{aligned} \vec{a}_1 &= \frac{a}{2} \times (1, \sqrt{3}, 0) \\ \vec{a}_2 &= \frac{a}{2} \times (-1, \sqrt{3}, 0) \\ \vec{a}_3 &= c \times (0, 0, 1) \end{aligned} \quad (4.2)$$

El vector posición del átomo (κ), en coordenadas cartesianas resulta:

$$\vec{r}(\kappa) = \left[\left(l_1 - l_2\right) \frac{a}{2} ; \left(l_1 + l_2 + \frac{2\kappa}{3}\right) \sqrt{3} \frac{a}{2} ; \left(l_3 + \frac{2\kappa - 1}{4}\right) c \right] \quad (4.3)$$

En la estructura hexagonal compacta existen 24 operaciones de simetría puntual ⁽⁵⁾, de las cuales 12 se detallan en la Tabla 4. Las otras 12 se obtienen combinando las anteriores con una inversión respecto de un punto como el 0 en la Fig.4.

Todas las operaciones de simetría que figuran en la Tabla 4 son rotaciones puras y se denotan como $\eta[k, l, m]$, siendo $2\pi/\eta$ el ángulo de rotación y $[k, l, m]$ la dirección del eje de rotación expresada en la base hexagonal. Todos los ejes pasan por el punto 0 y están señalados en la Fig. 4, salvo, el $[0, 0, 1]$, que coincide con el eje Z. Algunas rotaciones, indicadas con • en la Tabla 4, producen un intercambio de los átomos en las posiciones 1 con aquellos en las posiciones 2. Esto puede realizarse en la Fig.4 imaginando, por ejemplo, una rotación de un ángulo π alrededor del eje

Rotación	S_{1i}	S_{2i}	S_{3i}
1	1, 0, 0	0, 1, 0	0, 0, 1
2 [001]• v	$\bar{1}$, 0, 0	0, $\bar{1}$, 0	0, 0, 1
3 [001]	$\frac{\bar{1}}{2}, \frac{\bar{1}\sqrt{3}}{2}, 0$	$\frac{1\sqrt{3}}{2}, \frac{\bar{1}}{2}, 0$	0, 0, 1
3 [00 $\bar{1}$]	$\frac{1}{2}, \frac{\bar{1}\sqrt{3}}{2}, 0$	$\frac{\bar{1}\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}, 0$	0, 0, 1
6 [001]• v	$\frac{1}{2}, \frac{\bar{1}\sqrt{3}}{2}, 0$	$\frac{1\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}, 0$	0, 0, 1
6 [00 $\bar{1}$]• v	$\frac{1}{2}, \frac{1\sqrt{3}}{2}, 0$	$\frac{\bar{1}\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}, 0$	0, 0, 1
2 [$1\bar{1}0$]•	1, 0, 0	0, $\bar{1}$, 0	0, 0, $\bar{1}$
2 [100]•	$\frac{\bar{1}}{2}, \frac{1\sqrt{3}}{2}, 0$	$\frac{1\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}, 0$	0, 0, $\bar{1}$
2 [010]•	$\frac{\bar{1}}{2}, \frac{\bar{1}\sqrt{3}}{2}, 0$	$\frac{\bar{1}\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}, 0$	0, 0, $\bar{1}$
2 [$2\bar{1}0$] v	$\frac{1}{2}, \frac{1\sqrt{3}}{2}, 0$	$\frac{1\sqrt{3}}{2}, \frac{\bar{1}}{2}, 0$	0, 0, $\bar{1}$
2 [110] v	$\bar{1}$, 0, 0	0, 1, 0	0, 0, $\bar{1}$
2 [$\bar{1}20$] v	$\frac{1}{2}, \frac{\bar{1}\sqrt{3}}{2}, 0$	$\frac{\bar{1}\sqrt{3}}{2}, \frac{\bar{1}}{2}, 0$	0, 0, $\bar{1}$

• Operación que intercambia subredes 1 y 2.

v Operación que incluye una translación no primitiva $\frac{1}{2} \vec{a}_3$

Tabla 4 : Matrices correspondientes a las distintas rotaciones en la red hcp.

[001]. En este último caso sin embargo, para que la red quede invariable es necesario realizar adicionalmente una translación de $c/2$ en la dirección [001]. En la Tabla 4 se indican con una v las rotaciones que deben incluir dicha translación de $c/2$ para que la red permanezca invariante. No obstante, como hemos visto en la Sección 2, esta translación no afecta a la transformación de la matriz $\underline{G}(\vec{q})$, Ec. (2.6) y (2.7). En cambio sí tiene importancia para la transformación de $\underline{G}(\vec{q})$ el intercambio de subredes.

La matriz $T_{\alpha\beta}(\kappa\kappa', S)$ está formada por 4 bloques correspondientes a las cuatro combinaciones de valores 1 y 2 que se pueden tomar para $(\kappa\kappa')$. Si una operación intercambia los sitios 1 y 2, resulta $\mathfrak{J}(1)=2$, y por lo tanto $\delta_{1,1}^{\mathfrak{J}(1)} = \delta_{1,2}^{\mathfrak{J}(1)} = 0$. Se ve entonces en (2.7) que

el bloque de elementos $T_{\alpha\beta}(1\ 1, S)$ es nulo. Lo mismo ocurre con el bloque $T_{\alpha\beta}(2\ 2, S)$. En cambio $T_{\alpha\beta}(1\ 2, S) = S_{\alpha\beta} \delta_{1,2}^{\mathfrak{J}(2)} = S_{\alpha\beta} \delta_{1,1}^{\mathfrak{J}(2)} = S_{\alpha\beta}$. La matriz $\underline{T}(\underline{S})$, para una operación que intercambia subredes, tiene entonces la forma:

$$\underline{T}(\underline{S}) = \begin{bmatrix} \underline{0} & \underline{S} \\ \underline{S} & \underline{0} \end{bmatrix} \quad (4.4a)$$

donde la matriz \underline{S} está dada en la Tabla 4. Para una operación que no intercambia subredes resulta con un razonamiento análogo:

$$\underline{T}(\underline{S}) = \begin{bmatrix} \underline{S} & \underline{0} \\ \underline{0} & \underline{S} \end{bmatrix} \quad (4.4b)$$

Con el objeto de que quede claro el efecto de una operación que intercambia subredes, sobre el tensor de Green $\underline{G}(\vec{q})$, apliquemos a éste la transformación (4.4a):

$$\begin{aligned} \underline{G}(\underline{S}\vec{q}) &= \underline{T}(\underline{S}) \underline{G}(\vec{q}) \underline{T}^\dagger(\underline{S}) = \\ &= \begin{bmatrix} \underline{0} & \underline{S} \\ \underline{S} & \underline{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \underline{G}(11) & \underline{G}(12) \\ \underline{G}(21) & \underline{G}(22) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \underline{0} & \underline{S}^\dagger \\ \underline{S}^\dagger & \underline{0} \end{bmatrix} = \end{aligned}$$

$$= \begin{bmatrix} \underline{S} \underline{G}(22) \underline{S}+ & \underline{S} \underline{G} (21) \underline{S}+ \\ \underline{S} \underline{G}(12) \underline{S}+ & \underline{S} \underline{G} (11) \underline{S}+ \end{bmatrix} \quad (4.5)$$

Se ve que la submatriz $\underline{G}(11, \underline{S}\vec{q})$ de $\underline{G}(\underline{S}\vec{q})$ se obtiene aplicando \underline{S} a $\underline{G}(22, \vec{q})$, y análogamente los demás submatrices.

4.2 Zona de Brillouin. Parte irreducible.

Los vectores base de la red recíproca se obtienen de los de la red directa, Ec.(4.2), de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \vec{b}_1 &= \frac{2}{v_0} (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) = \frac{2\pi}{a} (1, 1/\sqrt{3}, 0) \\ \vec{b}_2 &= \frac{2}{v_0} (\vec{a}_3 \times \vec{a}_1) = \frac{2\pi}{a} (-1, 1/\sqrt{3}, 0) \\ \vec{b}_3 &= \frac{2}{v_0} (\vec{a}_1 \times \vec{a}_2) = \frac{2\pi}{c} (0, 0, 1) \end{aligned} \quad (4.6)$$

donde v_0 , el volumen de la celda primitiva, es

$$v_0 = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) = \frac{\sqrt{3}}{2} a^2 c \quad (4.7)$$

El vector \vec{b}_1 forma un ángulo de 60° con la dirección positiva de x , y \vec{b}_2 el mismo ángulo con la dirección negativa de x .

Los vectores \vec{q} pertenecientes a la primera zona de Brillouin deben satisfacer la condición :

$$\vec{q} \cdot \vec{G} \leq \frac{1}{2} |\vec{G}|^2 \quad (4.8)$$

para todo vector \vec{G} de la red recíproca.

Tomando \vec{G} como las posiciones de los puntos más cercanos a uno dado

en distintas direcciones de la red recíproca, se obtienen los límites de esta zona, como muestra la Fig. 6. En este caso el poliedro irreducible P es el que se destaca en esa figura, con vértices Γ , K, M, A, H, L. Hay 24 poliedros equivalentes a éste en toda la ZB, lo cuales se obtienen de P aplicando las 24 operaciones de simetría mencionadas en la Sección anterior. En la Fig. 6 se especifican, en la base recíproca $\{\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3\}$, las coordenadas de los vértices K, M y A.

Dentro del poliedro P de la figura 6 construiremos una red hexagonal de puntos \vec{q} .

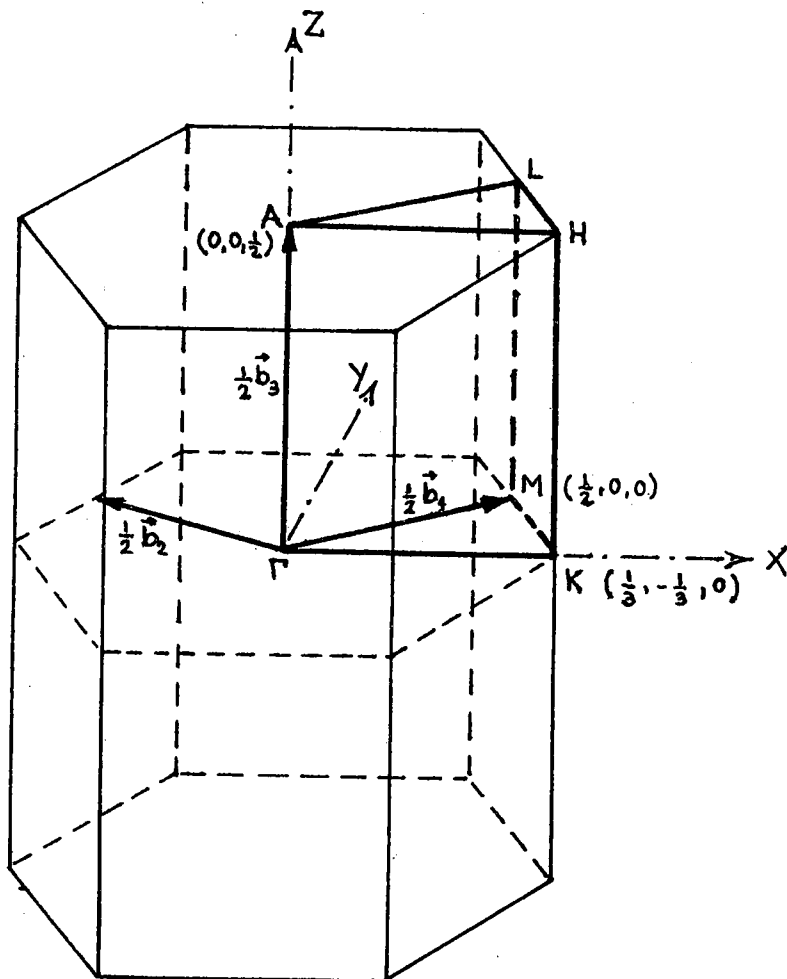


Fig. 6: Zona de Brillouin de la red hcp.

La componente de \vec{q} según z no ofrece dificultades, ya que ambos límites de P en esta dirección son planos normales al eje z .

Consideremos entonces la base ΓKM de P . Podemos subdividirla mediante la red hexagonal que se muestra en la Fig. 7. Esta red se genera fácilmente por combinación lineal de los vectores \vec{c}_1 y \vec{c}_2 mostrados en la figura. Si L es el número de subdivisiones en-

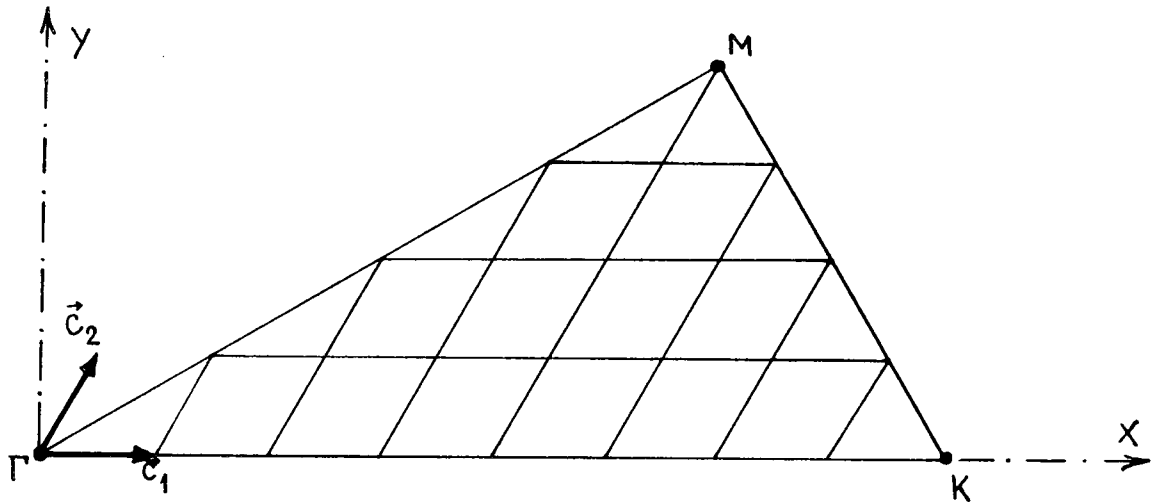


Figura 7: Subdivisión del poliedro irreducible.

tre Γ y K , entonces

$$\begin{aligned} \vec{c}_1 &= \frac{1}{L} \vec{q}_K = \frac{2\pi}{La} \left(\frac{1}{3} \vec{b}_1 - \frac{1}{3} \vec{b}_2 \right) \\ &= \frac{2\pi}{La} (2, 0, 0) \end{aligned} \tag{4.10}$$

donde la última expresión está en coordenadas cartesianas. La componente x de \vec{c}_2 se obtiene dividiendo por $2L$ la componente x de \vec{q}_K . La componente y de \vec{c}_2 resulta de dividir por $L/2$ la componente y de \vec{q}_M , como se puede ver en la Fig.7. Siendo:

$$\vec{q}_M = \frac{1}{2} \vec{b}_1 = \frac{\pi}{a} (1, 1/\sqrt{3}, 0) \tag{4.11}$$

resulta en coordenadas cartesianas,

$$\vec{c}_2 = \frac{2}{La} \left(\frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}}, 0 \right) \quad (4.12)$$

Si dividimos el segmento ΓA , en la Fig.6, también en L partes, tendremos un vector

$$\vec{c}_3 = \frac{1}{2L} \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{Lc} (0, 0, 1) \quad (4.13)$$

Los vectores \vec{q} que forman la red de la Fig. 7 se pueden expresar así

$$\vec{q} = i \vec{c}_1 + j \vec{c}_2 + k \vec{c}_3 \quad (4.14)$$

Para que \vec{q} pertenezca a P , se puede ver en la misma figura que debe cumplirse

$$\begin{aligned} 0 &\leq i \leq L \\ 0 &\leq j \leq \min(i, L - i) \\ 0 &\leq k \leq L \end{aligned} \quad (4.15)$$

En la Tabla 5 se especifican los grupos de simetría ⁽⁵⁾ de los distintos puntos característicos de P , el orden de cada uno de dichos grupos, o sea los números h_q de la ecuación (2.1), y las condiciones que cumplen los enteros (i, j, k) en cada uno de los puntos.

Punto		Grupo	h_q	$0 \leq j \leq i \leq L-j$	$0 \leq k \leq I$
interior		C_1	1		
caras	AHL	C_{1h}	2		=
	Γ KM			=	
	KMLH				=
	Γ ALM			=	
	Γ AHK			=	
aristas	HL	C_{2v}	4		=
	KM				=
	AL			=	
	Γ M			=	
	ML			=	=
	AH			=	
	Γ K			=	
KH	C_{3v}	6	=	=	
Γ A	C_{6v}	12	=	=	
vértices	L	D_{2h}	8		=
	M				=
	H	D_{3h}	12	=	=
	K			=	=
	A	D_{6h}	24	=	=
	Γ			=	=

Tabla 5: Características de los puntos pertenecientes a la parte irreducible de la ZB de la red hexagonal, con $\vec{q} = i\vec{c}_1 + j\vec{c}_2 + k\vec{c}_3$

4.3. Simetría del tensor de Green y su transformada de Fourier

Veremos algunas propiedades que limitan el número de componentes independientes del tensor de Green $\mathfrak{g}_{\alpha\beta}(l\kappa, l'\kappa')$ y de su transformada de Fourier $G_{\alpha\beta}(\kappa\kappa', \vec{q})$.

Como inversa de la matriz $\phi_{\alpha\beta}(l\kappa, l'\kappa')$, que es simétrica, $\mathfrak{g}_{\alpha\beta}(l\kappa, l'\kappa')$ tiene la misma propiedad:

$$\mathfrak{g}_{\alpha\beta}(l\kappa, l'\kappa') = \mathfrak{g}_{\beta\alpha}(l'\kappa', l\kappa) \quad (4.16)$$

Esto es válido en cualquier cristal y se debe a que la inversa de cualquier matriz simétrica es simétrica. Emplearemos ahora la operación de inversión, representada por una matriz $-\delta_{\alpha\beta}$. Teniendo en cuenta que esta operación produce un intercambio de las subredes 1 y 2, resulta:

$$\begin{aligned} \mathfrak{g}_{\alpha\beta}(l1, l'1) &= \sum_{\gamma\lambda} (-\delta_{\alpha\gamma}) (-\delta_{\beta\lambda}) \mathfrak{g}_{\gamma\lambda}(\bar{l}2, \bar{l}'2) \\ &= \mathfrak{g}_{\alpha\beta}(\bar{l}2, \bar{l}'2) \\ &= \mathfrak{g}_{\alpha\beta}(l'2, l2) \end{aligned} \quad (4.17)$$

donde \bar{l} corresponde al vector de la red $-\vec{r}_l$, el cual resulta de aplicar a \vec{r}_l la inversión. La última igualdad vale en virtud de la invariancia de la red ante translaciones, en particular la translación $\vec{r}_l + \vec{r}_{l'}$.

Análogamente se obtiene:

$$\mathfrak{g}_{\alpha\beta}(l1, l'2) = \mathfrak{g}_{\alpha\beta}(l'2, l1) \quad (4.18)$$

Combinando las relaciones (4.17) y (4.18) con la (4.16) resulta:

$$g_{\alpha\beta}(l_1, l'_1) = g_{\beta\alpha}(l_2, l'_2) \quad (4.19)$$

$$g_{\alpha\beta}(l_2, l'_1) = g_{\beta\alpha}(l_2, l'_1)$$

Utilizando la relación de ortogonalidad (1.10) podemos invertir la transformación (1.17) para obtener:

$$G_{\alpha\beta}(\kappa\kappa', \vec{q}) = \sum_l g_{\alpha\beta}(l\kappa, l'\kappa') e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}(l\kappa, l'\kappa')} \quad (4.20)$$

Si bien la red hcp posee centros de inversión, éstos no coinciden con los sitios atómicos, como ocurre en las redes cúbicas primitivas. Es decir, dado un vector $\vec{r}(l\kappa, l'\kappa')$ que conecte dos sitios atómicos cualesquiera, no siempre es posible obtener mediante una operación que deje invariante la red, un vector $\vec{r}(l''\kappa, l''\kappa') = -\vec{r}(l\kappa, l'\kappa')$. Por lo tanto de (4.20) se desprende que $G_{\alpha\beta}(\kappa\kappa', \vec{q})$ es complejo.

También se ve que :

$$G_{\alpha\beta}(\kappa\kappa', -\vec{q}) = G_{\alpha\beta}^*(\kappa\kappa', \vec{q}) \quad (4.21)$$

Además, siendo $g_{\alpha\beta}(l\kappa, l'\kappa')$ simétrica, según (4.16), $G_{\alpha\beta}(\kappa\kappa', \vec{q})$ resulta hermítica :

$$G_{\alpha\beta}(\kappa\kappa', \vec{q}) = G_{\beta\alpha}^*(\kappa'\kappa, \vec{q}) \quad (4.22)$$

A continuación emplearemos en 1er. lugar, de la misma forma que en (4.17), la operación de inversión que transforma \vec{q} en $-\vec{q}$ y 2 en 1, y en 2º lugar, la relación (4.21):

$$G_{\alpha\beta}(22, \vec{q}) = G_{\alpha\beta}(11, -\vec{q}) = G_{\alpha\beta}^*(11, \vec{q}) \quad (4.23)$$

Análogamente vale :

$$G_{\alpha\beta} (21, \vec{q}) = G_{\alpha\beta}^* (12, \vec{q}) \quad (4.24)$$

Las propiedades (4.23) y (4.24) implican que la matriz $\underline{G}(\vec{q})$ tiene la forma

$$\underline{G}(\vec{q}) = \begin{bmatrix} \underline{G}(11, \vec{q}) & \underline{G}(12, \vec{q}) \\ \underline{G}^*(12, \vec{q}) & \underline{G}^*(11, \vec{q}) \end{bmatrix} \quad (4.25)$$

con sólo dos submatrices independientes, de dimensión 3 x 3 cada una. Además, por la propiedad (4.22) la submatriz $\underline{G}(11, \vec{q})$ es hermitica y la $\underline{G}(12, \vec{q})$ es simétrica :

$$\begin{aligned} G_{\alpha\beta} (11, \vec{q}) &= G_{\beta\alpha}^* (11, \vec{q}) \\ G_{\alpha\beta} (12, \vec{q}) &= G_{\beta\alpha} (12, \vec{q}) \end{aligned} \quad (4.26)$$

Para concluir, hallaremos la expresión de las submatrices $\underline{G}(11, \vec{q})$ y $\underline{G}(12, \vec{q})$ en términos de las correspondientes submatrices de $\underline{\Phi}(\vec{q})$. Esta última tiene la misma forma que $\underline{G}(\vec{q})$, es decir, (4.25) con $\underline{\Phi}$ en lugar de G . Siendo \underline{G} la inversa de $\underline{\Phi}$ se cumple

$$\begin{bmatrix} \underline{\Phi}(11) & \underline{\Phi}(12) \\ \underline{\Phi}^*(12) & \underline{\Phi}^*(11) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \underline{G}(11) & \underline{G}(12) \\ \underline{G}^*(12) & \underline{G}^*(11) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \underline{1} & \underline{0} \\ \underline{0} & \underline{1} \end{bmatrix} \quad (4.27)$$

donde se deja sobreentendida la dependencia respecto de \vec{q} . De aquí se obtienen las dos ecuaciones independientes siguientes :

$$\begin{aligned} \underline{\Phi} (11) \underline{G} (11) + \underline{\Phi} (12) \underline{G}^* (12) &= \underline{1} \\ \underline{\Phi}^* (12) \underline{G} (11) + \underline{\Phi}^* (11) \underline{G}^* (12) &= \underline{0} \end{aligned} \quad (4.28)$$

La solución de éstas se puede escribir en la forma :

$$\underline{G} (11) = \left\{ \underline{\Phi} (11) - \underline{\Phi} (12) \underline{A} \right\}^{-1} \quad (4.29)$$

$$\underline{G}^* (12) = -\underline{A} \underline{G} (11) \quad (4.30)$$

donde

$$\underline{A} = \left\{ \underline{\Phi} (11)^{-1} \underline{\Phi} (12) \right\}^* \quad (4.31)$$

4.4. Reducción de la suma de Fourier

Para el caso de la red hcp la suma sobre S, en la expresión (2.1) de la función de Green, se extiende a las 24 operaciones de simetría puntual mencionadas en la Sección 4.1 :

$$g_{\alpha\beta} (l\kappa, l'\kappa') = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q} \in P} \frac{1}{h_q} \sum_S^{24} G_{\alpha\beta} (\kappa\kappa', \underline{S}\vec{q}) e^{i\underline{S}\vec{q} \cdot \vec{r} (l\kappa, l'\kappa')} \quad (4.32)$$

De esas 24 operaciones, 12 están representadas por las matrices \underline{S} dadas en la Tabla 4 y las restantes por matrices $-\underline{S}$, que resultan de multiplicar cada una de las anteriores por la inversión. Entonces a cada término de (4.32), con \underline{S} extraída de la Tabla 4, le corresponde uno con $-\underline{S}$. Por la propiedad (4.21), los términos correspondientes a $+\underline{S}$ y $-\underline{S}$ son mutuamente conjugados. Agrupándolos resulta :

$$g_{\alpha\beta}(l\kappa, l'\kappa') = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q} \in P} \frac{1}{h_q} \Gamma_{\alpha\beta}(l\kappa, l'\kappa'; q) \quad (4.33)$$

con

$$\Gamma_{\alpha\beta}(l\kappa, l'\kappa'; \vec{q}) = 2 \sum_S^{12} \text{Re} \left\{ G_{\alpha\beta}(\kappa\kappa', \underline{S}\vec{q}) e^{i\underline{S}\vec{q} \cdot \vec{r}(l\kappa, l'\kappa')} \right\} \quad (4.34)$$

Aquí la suma abarca únicamente las 12 operaciones de la Tabla 4. Separando $\underline{G}(\vec{q})$ en sus partes real e imaginaria,

$$\underline{G} = \underline{A} + i \underline{B} \quad (4.35)$$

se obtiene :

$$\Gamma_{\alpha\beta}(l\kappa, l'\kappa'; \vec{q}) = 2 \sum_S^{12} \{ A_{\alpha\beta}(\kappa\kappa', \underline{S}\vec{q}) \cos(\underline{S}\vec{q} \cdot \vec{r}) - B_{\alpha\beta}(\kappa\kappa', \underline{S}\vec{q}) \text{sen}(\underline{S}\vec{q} \cdot \vec{r}) \} \quad (4.36)$$

donde $\vec{r} \equiv \vec{r}(l\kappa, l'\kappa')$.

$\underline{G}(\underline{S}\vec{q})$ se obtiene de $\underline{G}(\vec{q})$ aplicando (2.6) con $\underline{T}(\underline{S})$ dada por (4.4b), según que la operación intercambie o no subredes. Sin embargo la forma particular de la matriz $\underline{G}(\vec{q})$, mostrada en la Ec.(4.25), permite trabajar con las submatrices $\underline{G}(11, \vec{q})$ y $\underline{G}(12, \vec{q})$ únicamente.

Para cualquiera de estas dos, teniendo en cuenta (4.5) y las propiedades (4.23) y (4.24), resulta :

$$\underline{G}(\kappa\kappa', \underline{S}\vec{q}) = \begin{cases} \underline{S} \underline{G}(\kappa\kappa', \vec{q}) \underline{S}^+ \\ \underline{S} \underline{G}^*(\kappa\kappa', \vec{q}) \underline{S}^+ \end{cases} \quad (4.37)$$

donde la 2a. o la 1a. expresión valen según que la operación intercambie

o no subredes, respectivamente.

A continuación realizaremos las operaciones matriciales planteadas en (4.37) para cada una de las rotaciones de la Tabla 4. Como los índices de sitio en la celda unitaria, $(\kappa \kappa')$, no se ven afectados en las relaciones (4.37), los suprimiremos por el momento. Además, denominaremos $G_{\alpha\beta}$ a los elementos de la matriz de 3×3 $\underline{G}(\kappa \kappa', \vec{q})$, con $\vec{q} \in P$. En el caso de una operación que intercambie subredes las expresiones resultarán en función de $G_{\alpha\beta}^*$, lo cual indicará que hay que tomar $-B_{\alpha\beta}(\kappa \kappa', \vec{q})$ en lugar de $B_{\alpha\beta}(\kappa \kappa', \vec{q})$.

Rotaciones de orden 2 alrededor de los ejes cartesianos.

Estas operaciones sólo producen un cambio de signo de las coordenadas correspondientes a los ejes ortogonales al de rotación. Cada elemento de matriz $G_{\alpha\beta}$ sólo podrá sufrir un cambio de signo, el cual variará como el signo del producto de coordenadas $x_\alpha x_\beta$. El vector (q_x, q_y, q_z) se transforma como (x, y, z) . Resultan entonces las expresiones de $\underline{S}\vec{q}$ y $G_{\alpha\beta}(\underline{S}\vec{q})$ que se muestran en la Tabla 6 para la operación identidad $1[0]$ y las rotaciones binarias en torno de los 3 ejes cartesianos.

Tabla 6

Rotación	$\underline{S}\vec{q}$	$G_{\alpha\beta}(\underline{S}\vec{q})$			
		$\alpha\alpha$	yz	xz	xy
1 [0]	$q_x \quad q_y \quad q_z$	$G_{\alpha\alpha}$	G_{yz}	G_{xz}	G_{xy}
2 [$\bar{1}\bar{1}0$] •	$q_x \quad -q_y \quad -q_z$	$G_{\alpha\alpha}^*$	G_{yz}^*	$-G_{xz}^*$	$-G_{xy}^*$
2 [110]	$-q_x \quad q_y \quad -q_z$	$G_{\alpha\alpha}$	$-G_{yz}$	G_{xz}	$-G_{xy}$
2 [001] •	$-q_x \quad -q_y \quad q_z$	$G_{\alpha\alpha}^*$	$-G_{yz}^*$	$-G_{xz}^*$	G_{xy}^*

(•) Operaciones que intercambian subredes.

Rotaciones binarias en torno de ejes no cartesianos.

La expresión general de la matriz de rotación en un ángulo $2\pi/n$ alrededor de un eje cuyos cosenos directores son (l_x, l_y, l_z) está dado por :

$$\underline{S}_n^{\vec{l}} = \begin{bmatrix} c_n + l_x^2 (1-c_n) & l_x l_y (1-c_n) - l_z s_n & l_x l_z (1-c_n) - l_y s_n \\ l_x l_y (1-c_n) + l_z s_n & c_n + l_y^2 (1-c_n) & l_y l_z (1-c_n) - l_x s_n \\ l_x l_z (1-c_n) + l_y s_n & l_y l_z (1-c_n) + l_x s_n & c_n + l_z^2 (1-c_n) \end{bmatrix} \quad (4.38)$$

con $c_n = \cos \frac{2\pi}{n}$ $s_n = \text{sen } \frac{2\pi}{n}$

Para un eje binario $n=2$, entonces :

$$c_2 = \cos \pi = -1 \quad s_2 = \text{sen } \pi = 0$$

Consideraremos los 4 ejes binarios no coincidentes con ejes cartesianos. (ver la Figura 4). Como todos ellos son normales al eje z, $l_z=0$, y resulta :

$$\underline{S}_2^{\vec{l}} = \begin{bmatrix} -1 + 2 l_x^2 & 2 l_x l_y & 0 \\ 2 l_x l_y & -1 + 2 l_y^2 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (4.39)$$

Los cosenos directores, l_x, l_y de los cuatro ejes en consideración son :

	l_x	l_y	
2 [100]	$\frac{1}{2}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	
2 [010]	$-\frac{1}{2}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	
2 [2 $\bar{1}$ 0]	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	$\frac{1}{2}$	(4.40)
2 [$\bar{1}$ 20]	$-\frac{\sqrt{3}}{2}$	$\frac{1}{2}$	

Para cualquiera de los 4 ejes resulta una matriz de la forma :

$$\underline{S}_2^{\vec{i}} = \begin{bmatrix} c & s & 0 \\ s & -c & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (4.41)$$

donde para cada eje se tiene, según (4.39) y (4.40) :

	c	s	
2 [100]	$-1/2$	$\sqrt{3}/2$	
2 [010]	$-1/2$	$-\sqrt{3}/2$	(4.42)
2 [2 $\bar{1}$ 0]	$1/2$	$\sqrt{3}/2$	
2 [$\bar{1}$ 20]	$1/2$	$-\sqrt{3}/2$	

Con una matriz \underline{S} dada por (4.41) obtenemos la siguiente expresión de $\underline{SGS}^{\dagger}$:

$$\left[\begin{array}{ccc} \frac{1}{4} G_{xx} + \frac{3}{4} G_{yy} + cs(G_{xy} + G_{yx}) & -\frac{1}{4} G_{xy} + \frac{3}{4} G_{yx} + cs(G_{xx} - G_{yy}) & -cG_{xz} - sG_{yz} \\ -\frac{1}{4} G_{yx} + \frac{3}{4} G_{xy} + cs(G_{xx} - G_{yy}) & \frac{1}{4} G_{yy} + \frac{3}{4} G_{xx} - cs(G_{xy} + G_{yx}) & cG_{yz} - sG_{xz} \\ -cG_{zx} - sG_{zy} & cG_{zy} - sG_{zx} & G_{zz} \end{array} \right] \quad (4.43)$$

donde se ha reemplazado c^2 y s^2 por $\frac{1}{4}$ y $\frac{3}{4}$, respectivamente, según resulta de (4.42).

Si aplicamos la matriz \underline{S} dada en (4.41) al vector \vec{q} se obtiene :

$$\underline{S}\vec{q} = (cq_x + sq_y, sq_x - cq_y, -q_z) \quad (4.44)$$

Rotaciones de orden 3 y 6 en torno del eje Z.

Las matrices correspondientes se obtienen de la expresión general (4.38) considerando $l_x = l_y = 0$ y tomando $n = \pm 3, \pm 6$. Resultan matrices de la forma :

$$\underline{S}_{\vec{n}} = \begin{bmatrix} c & -s & 0 \\ s & c & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (4.45)$$

donde c y s son los cosenos y senos de $\pm 60^\circ$ y $\pm 120^\circ$, de modo que para estas 4 operaciones se tiene :

	c	s	
3 [001]	-1/2	$\sqrt{3}/2$	(4.46)
3 [00 $\bar{1}$]	-1/2	$-\sqrt{3}/2$	
6 [001]	1/2	$\sqrt{3}/2$	
6 [00 $\bar{1}$]	1/2	$-\sqrt{3}/2$	

Usando la expresión (4.45) para \underline{S} resulta la siguiente matriz $\underline{S} \underline{G} \underline{S}^+$:

$$\left[\begin{array}{ccc} \frac{1}{4}G_{xx} + \frac{3}{4}G_{yy} - cs(G_{xy} + G_{yx}) & \frac{1}{4}G_{xy} - \frac{3}{4}G_{yx} + cs(G_{xx} - G_{yy}) & cG_{xz} - sG_{yz} \\ \frac{1}{4}G_{yx} - \frac{3}{4}G_{xy} + cs(G_{xx} - G_{yy}) & \frac{1}{4}G_{yy} + \frac{3}{4}G_{xx} + cs(G_{xy} + G_{yx}) & cG_{yz} + sG_{xz} \\ cG_{zx} - sG_{zy} & cG_{zy} + sG_{zx} & G_{zz} \end{array} \right] \quad (4.47)$$

Operando con (4.45) sobre $\underline{\hat{q}}$ se obtiene :

$$\underline{S\hat{q}} = (cq_x - sq_y, sq_x + cq_y, q_z) \quad (4.48)$$

Reemplazando las (4.42) en (4.43) y (4.44) y las (4.46) en (4.47) y (4.48), teniendo presente además (4.37), resultan los vectores $\underline{S\hat{q}}$ y los elementos de matriz $G_{\alpha\beta}(\underline{S\hat{q}})$ indicados en la Tabla 7.

Tabla 7

Rotación	\underline{Sq}	$G_{\alpha\beta}(\underline{S\hat{q}})$					
		xx	yy	zz	yz	xz	xy
2 [010] •	$-q'_x - q'_y - q_z$	G_{xx}^{+*}	G_{yy}^{-*}	G_{zz}^*	$-G_{yz}^{-*}$	G_{xz}^{+*}	$-G_{xy}^{-*}$
3 [001]	$-q'_x \ q'_y \ q_z$	G_{xx}^+	G_{yy}^-	G_{zz}	$-G_{yz}^-$	$-G_{xz}^+$	G_{xy}^-
6 [00 $\bar{1}$] •	$q'_x - q'_y \ q_z$	G_{xx}^{+*}	G_{yy}^{-*}	G_{zz}^*	G_{yz}^{-*}	G_{xz}^{+*}	G_{xy}^{-*}
2 [2 $\bar{1}$ 0]	$q'_x \ q'_y - q_z$	G_{xx}^+	G_{yy}^-	G_{zz}	G_{yz}^-	$-G_{xz}^+$	$-G_{xy}^-$
2 [$\bar{1}$ 20]	$-q''_x + q''_y - q_z$	G_{xx}^-	G_{yy}^+	G_{zz}	G_{yz}^+	$-G_{xz}^-$	$-G_{xy}^+$
6 [001] •	$-q''_x \ q''_y \ q_z$	G_{xx}^{-*}	G_{yy}^{+*}	G_{zz}^*	G_{yz}^{+*}	G_{xz}^{-*}	G_{xy}^{+*}
3 [00 $\bar{1}$]	$q''_x - q''_y \ q_z$	G_{xx}^-	G_{yy}^+	G_{zz}	$-G_{yz}^+$	$-G_{xz}^-$	G_{xy}^+
2 [100] •	$q''_x \ q''_y - q_z$	G_{xx}^{-*}	G_{yy}^{+*}	G_{zz}^*	$-G_{yz}^{+*}$	G_{xz}^{-*}	$-G_{xy}^{+*}$

(•) operaciones que intercambian subredes.

En ésta se define :

$$\vec{q}' = (q'_x, q'_y, q'_z) = \left(\frac{1}{2} q_x + \frac{\sqrt{3}}{2} q_y, \frac{\sqrt{3}}{2} q_x - \frac{1}{2} q_y, q_z \right) \quad (4.49)$$

$$\vec{q}'' = (q''_x, q''_y, q''_z) = \left(-\frac{1}{2} q_x + \frac{\sqrt{3}}{2} q_y, \frac{\sqrt{3}}{2} q_x + \frac{1}{2} q_y, q_z \right)$$

$$G_{xx}^+ = \frac{1}{4} \left[G_{xx} + 3 G_{yy} + \sqrt{3} (G_{xy} + G_{yx}) \right]$$

$$G_{yy}^+ = \frac{1}{4} \left[G_{yy} + 3 G_{xx} + \sqrt{3} (G_{xy} + G_{yx}) \right] \quad (4.50)$$

$$G_{xy}^+ = \frac{1}{4} \left[G_{xy} - 3 G_{yx} + \sqrt{3} (G_{xx} - G_{yy}) \right]$$

$$G_{xz}^+ = \frac{1}{2} (G_{xz} + 3 G_{yz})$$

$$G_{yz}^+ = \frac{1}{2} (G_{yz} + 3 G_{xz})$$

Se trata ahora de realizar la sumatoria de la Ec.(4.36), considerando separadamente las partes reales e imaginarias de las expresiones de $G_{\alpha\beta}(\underline{S}\vec{q})$ dadas en las Tablas 6 y 7. Las partes reales se multiplican por los cosenos y las imaginarias por los senos de los correspondientes $\underline{S}\vec{q} \cdot \vec{r}$. Los productos así obtenidos se suman por columnas de las mencionadas tablas. Obsérvese que los cuatro elementos de una dada columna en la Tabla 6 tienen la misma parte real y la misma imaginaria, salvo diferencias de signo. Lo mismo ocurre en cualquier columna de la Tabla 7 con los cuatro primeros o cuatro últimos elementos. Esta circunstancia permite agrupar de a cuatro los senos o cosenos de $\underline{S}\vec{q} \cdot \vec{r}$, resultando expresiones que se pueden compactar usando las siguientes relaciones trigonométricas :

$$\begin{aligned} \cos(-x-y-z) + \cos(-x+y+z) + \cos(x-y+z) + \cos(x+y-z) &= 4\cos x \cos y \cos z \\ \text{"} \quad \quad \quad + \quad \quad \quad \text{"} \quad \quad \quad \text{"} \quad \quad \quad \text{"} \quad \quad \quad \text{"} &= -4\cos x \sin y \sin z \\ \sin(-x-y-z) + \sin(-x+y+z) + \sin(x-y+z) + \sin(x+y-z) &= 4\sin x \sin y \sin z \\ \text{"} \quad \quad \quad + \quad \quad \quad \text{"} \quad \quad \quad \text{"} \quad \quad \quad \text{"} \quad \quad \quad \text{"} &= -4\sin x \cos y \cos z \end{aligned} \quad (4.51)$$

Llamaremos

$$\begin{aligned} c_{\alpha} &= \cos (q_{\alpha} r_{\alpha}) & \alpha &= x, y, z & (4.52) \\ s_{\alpha} &= \operatorname{sen} (q_{\alpha} r_{\alpha}) \end{aligned}$$

poniendo c' o c'' en lugar de c , y s' o s'' en lugar de s , cuando el argumento contenga las componentes de \vec{q}' o \vec{q}'' respectivamente, en lugar de las de \vec{q} .

Además emplearemos la siguiente simbología :

$$\begin{aligned} [c c]_{\pm} &= c'_x c'_y \pm c''_x c''_y \\ [c s]_{\pm} &= c'_x s'_y \pm c''_x s''_y \\ [s c]_{\pm} &= s'_x c'_y \pm s''_x c''_y \\ [s s]_{\pm} &= s'_x s'_y \pm s''_x s''_y \end{aligned} \tag{4.53}$$

Finalmente se obtienen las siguientes expresiones para $\Gamma_{\alpha\beta}(l, l'; \vec{q})$:

$$\begin{aligned} \Gamma_{xx} = 2 c_z \{ & A_{xx} (4 c_x c_y + [cc]_{+}) + 3 A_{yy} [cc]_{+} + 2\sqrt{3} A_{xy} [cc]_{-} \\ & - B_{xx} (4 c_x s_y + [cs]_{-}) - 3 B_{yy} [cs]_{-} - \sqrt{3} (B_{xy} + B_{yx}) [cs]_{+} \} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Gamma_{yy} = 2 c_z \{ & A_{yy} (4 c_x c_y + [cc]_{+}) + 3 A_{xx} [cc]_{+} - 2\sqrt{3} A_{xy} [cc]_{-} \\ & - B_{yy} (4 c_x s_y + [cs]_{-}) - 3 B_{xx} [cs]_{-} + \sqrt{3} (B_{xy} + B_{yx}) [cs]_{+} \} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \Gamma_{zz} &= 8c_z \{ A_{zz} (c_x c_y + [cc]_+) - B_{zz} (c_x s_y + [cs]_-) \} \\
 \Gamma_{yz} &= 4s_z \{ A_{yz} ([cs]_- - 2 c_x s_y) - \sqrt{3} A_{xz} [cs]_+ \\
 &\quad + B_{yz} ([cc]_+ - 2 c_x c_y) - \sqrt{3} B_{xz} [cc]_- \} \\
 \Gamma_{xz} &= 4s_z \{ -A_{xz} ([sc]_- + 2 s_x c_y) - \sqrt{3} A_{yz} [sc]_+ \\
 &\quad + B_{xz} ([ss]_+ + 2 s_x s_y) + \sqrt{3} B_{yz} [ss]_- \} \\
 \Gamma_{xy} &= 2c_z \{ \sqrt{3} (A_{yy} - A_{xx}) [ss]_- - 2 A_{xy} (2 s_x s_y + [ss]_+ \\
 &\quad + \sqrt{3} (B_{yy} - B_{xx}) [sc]_+ - 4 B_{xy} s_x c_y + (B_{xy} - 3 B_{yx}) [sc]_- \}
 \end{aligned} \tag{4.54}$$

donde se omiten los índices $(\kappa\kappa')$ en $A_{\alpha\beta}$ y $B_{\alpha\beta}$, y $(l\kappa, l'\kappa')$ en

$\Gamma_{\alpha\beta}$.

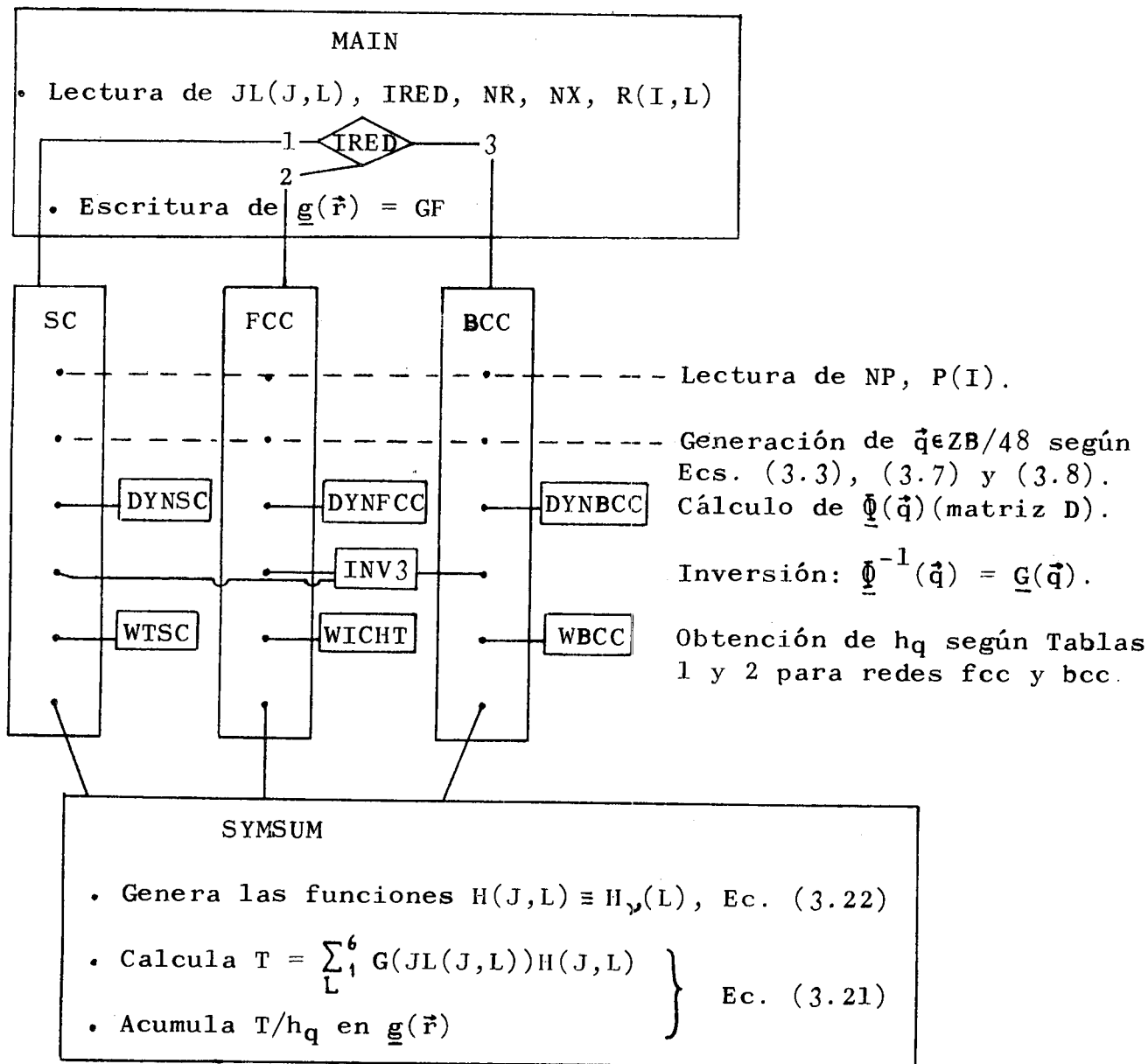
Teniendo en cuenta las ecuaciones (4.26) y (4.36) resulta

$\Gamma_{\alpha\beta}(l\kappa, l'\kappa'; \vec{q}) = \Gamma_{\beta\alpha}(l\kappa, l'\kappa'; \vec{q})$ para $\kappa \neq \kappa'$. En cambio $\Gamma_{\alpha\beta}(l\kappa, l'\kappa'; \vec{q})$ difiere de $\Gamma_{\beta\alpha}(l\kappa, l'\kappa'; \vec{q})$ en los signos de los coeficientes $B_{\alpha\beta}$.

Además en este caso $B_{\alpha\alpha} = 0$.

5. Programas para cálculos de funciones de Green en redes cúbicas y hcp.

GRECUB- Cálculo de la función de Green en cualquiera de las tres redes cúbicas.



Datos de entrada:

$JL(J,L)$ es el arreglo $\mu(J,L)$ de la Tabla 3

$IRED = 1$ para cálculo en red sc, 2 para fcc y 3 para bcc

$NR = N^{\circ}$ de posiciones atómicas donde ha de ser calculada la función de Green GF

$NX = N^{\circ}$ de subdivisiones del poliedro P en la dirección X (es L en Ecs. (3.3), (3.7) y (3.8)).

NP = N° de parámetros que intervienen en el cálculo de $\underline{\Phi}(\vec{q})$.

P(I) = Valores de dichos parámetros. Estos, así como sus unidades, dependerán de la subrutina de cálculo de $\underline{\Phi}(\vec{q})$, variable según el modelo de interacciones atómicas. La función de Green resulta en unidades inversas a las de $\underline{\Phi}(\vec{q})$.

FILE: GRECUB FORTRAN A CNEA - CMS - REL 6 PLC 06

```
C  ** LATTICE GREEN FUNCTION FOR ANY OF THE CUBIC BRAVAIS LATTICES **
C  ** FILES : GRECUB FCC/BCC SYMSUM DYFCCOD/10/20 **
C  ** SUBROUTINES : FCC DYNFCC WICHT BCC WBCC INV3 SYMSUM **
C  IRED      1 FOR A SC LATTICE, 2 FOR FCC AND 3 FOR BCC
C  NR        NR OF LATTICE POSITIONS WHERE THE GREEN FUNCTION IS WANTED
C            (NOT GREATER THAN THE 2ND DIMENSION SPECIFIED IN R AND GF)
C  NX        NUMBER OF INTERVALS TAKEN FROM GAMMA TO X IN THE BRILLOUIN
C            ZONE. AN INTERVAL IS EQUAL TO THE SIDE OF THE CUBIC ELEMEN-
C            TARY CELL WHICH GENERATES THE Q-POINT MESH IN THE IRREDUCIBLE
C            PART OF THE BRILLOUIN ZONE
C  JL(J,L)   SPECIFIES, IN VOIGT NOTATION, THE INDEX PAIR CORRESPONDING
C            TO THE INDEX PAIR J WHEN THE COMPONENTS OF THE WAVEVECTOR
C            ARE PERMUTED AS INDICATED BY L, IN A CERTAIN CONVENTION
C  R(I,L)    ATOMIC POSITIONS. I = CARTESIAN COMPONENT. L = 1,...NR.
C            (UNIT = THE LATTICE CONSTANT)
C  GF(J,L)   IS THE ELEMENT J (IN VOIGT NOTATION) OF THE GREEN FUNCTION
C            SUBMATRIX CORRESPONDING TO THE ATOM PAIR L
C            IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
C            COMMON/BI/JL(6,6),R(3,100),GF(6,100),NR
C            READ (5,1)((JL(J,L),L=1,6),J=1,6)
C            1 FORMAT(6I2)
C            READ(5,2) NR,NX
C            2 FORMAT(2(4X14))
C            DO 3 L=1,NR
C            READ(5,4) (R(I,L),I=1,3)
C            4 FORMAT(3F10.5)
C            DO 3 J=1,6
C            3 GF(J,L)=0.
C            CALL SC(NX,NQR,TNQ)
C            CALL FCC(NX,NQR,TNQ)
C            CALL BCC(NX,NQR,TNQ)
C            A=8./TNQ
C            WRITE(6,12) NX,NQR,TNQ
C            12 FORMAT(4H NX=,I3,5H NQR=,I5,5H TNQ=,F9.1//5X1HR10X3HGXX8X3HGY
C            & 8X3HGZZ8X3HGYZ8X3HGZX8X3HGXY/39X10HE-4 CM/DYN)
C            DO 9 L=1,NR
C            DO 10 J=1,6
C            10 GF(J,L)=GF(J,L)*A
C            TRG=GF(1,L)+GF(2,L)+GF(3,L)
C            9 WRITE(6,11) (R(J,L),J=1,3),TRG,GF(J,L),J=1,6)
C            11 FORMAT(3F4.1,53X4HTRG=E11.4/12X&E11.4)
C            STOP
C            END
```

```

SUBROUTINE FCC(NX,NY,T)
C GENERATION OF A BCC MESH IN THE IRREDUCIBLE PART OF THE FCC BRILLOUIN
C ZONE
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
DIMENSION Q(3),G(6),P(10),D(6)
READ(5,2)NP,(P(I),I=1,NP)
2 FORMAT(4X12/8F10.5)
L=2*NX
C=6.283185/DFLOAT(L)
N=1.
T=1.
IM=L+1
JO=3*L/2+2
M=2
DO 4 I=2,IM
  IT=I-1
  Q(1)=C*DFLOAT(IT)
  JM=MIND(I,JO-I)
  DO 1 J=M,JM,2
    JJ=J-1
    W(2)=C*DFLOAT(JJ)
    KM=MIND(JJ,JO-I-JJ)
    KK=M-1
5 IF (KK-KM) 3,3,1
3 W=WFCF(I,JJ,KK,L)
  Q(3)=C*DFLOAT(KK)
  CALL DYNECC(Q,P,D,NP)
  CALL INV3(D,G)
  CALL SYMSUM(Q,W,G)
  T=T+48./W
  N=N+1
  KK=KK+2
  GO TO 5
1 CONTINUE
4 M=3-M
  RETURN
END
FUNCTION WFCF(I,J,K,L)
C WIGHTS FOR POINTS IN THE IRREDUCIBLE PART OF THE FCC BRILLOUIN ZONE
REAL*8 WFCF
M=(L-I)*(I-J)
IF (K*(J-K)) 9,12,11
11 M=M*((I+K-L)**2+(I+J-L)**2)
12 IF (M) 9,2,1
21 IF (M) 9,22,21
21 IF (J) 9,8,2
22 IF (I+K-2*J) 31,32,31
31 IF (J) 9,16,4
32 IF (J*(L-2*J)) 9,41,6
41 IF (I+J-L) 48,13,8
1 WFCF=1.
  RETURN
2 WFCF=2.
  RETURN
4 WFCF=4.
  RETURN
6 WFCF=6.
  RETURN
8 WFCF=8.
  RETURN
13 WFCF=12.
  RETURN
16 WFCF=16.
  RETURN
48 WFCF=48.
  RETURN
9 WFCF=0.
  RETURN
END
```

C SUBROUTINE BCC(NX,N,T)
C GENERATION OF A FCC MESH IN THE IRREDUCIBLE PART OF THE BCC BRILLOUIN
C ZONE

IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
DIMENSION Q(3)

M=2
N=M-1
T=DFLOAT(N)
L=2*NX
C=6.283185/DFLOAT(L)
LL=L+1

DO 4 II=M,LL
I=II-1
Q(1)=C*DFLOAT(II)
JM=MINO(II,LL-I)

K1=0
DO 1 JJ=M,JM
J=JJ-1
Q(2)=C*DFLOAT(J)
K=K1

6 W=WBCC(I,J,K,L)
Q(3)=C*DFLOAT(K)
C CALL DYNBCC(Q,P,0)
CALL INV3(D,G)
CALL SYMSUM(Q,W,G)

T=T+48./W
N=N+1
K=K+2
IF (K-J) 6,6,1

1 K1=I-K1
4 M=3-M
RETURN
END

FUNCTION WBCC(I,J,K,L)

C CALCULATES THE ORDER OF THE Q-GROUPS FOR POINTS IN THE IRREDUCIBLE
C PART OF THE BCC BRILLOUIN ZONE

REAL*8 WBCC
IF(K)3,2,1

2 IF(K-J)4,5,3
5 IF(J-I)6,7,3

7 WBCC=48.
RETURN

6 IF(J-(L-I))8,9,3

9 WBCC=48.
RETURN

8 WBCC=8.
RETURN

4 IF(J-I)10,11,3

11 IF(J-(L-I))12,13,3

13 WBCC=8.
RETURN

12 WBCC=4.
RETURN

RETURN

10 IF(J-(L-I))14,15,3

15 WBCC=4.
RETURN

14 WBCC=2.
RETURN

RETURN

1 IF(K-J)16,17,3

17 IF(J-I)18,19,3

19 IF(J-(L-I))20,21,3

21 WBCC=24.
RETURN

20 WBCC=6.
RETURN

RETURN

18 IF(J-(L-I))22,23,3

23 WBCC=6.
RETURN

RETURN

22 WBCC=2.
RETURN

RETURN

16 IF(J-I)24,25,3

25 IF(J-(L-I))26,27,3

27 WBCC=6.
RETURN

RETURN

26 WBCC=2.
RETURN

RETURN

24 IF(J-(L-I))28,29,3

29 WBCC=2.
RETURN

RETURN

28 WBCC=1.
RETURN

RETURN

3 WRITE(6,30)

30 FORMAT(1X,'ERROR EN IQ')

RETURN
END

```

SUBROUTINE SYMSUM(Q,W,G)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,U-Z)
DIMENSION Q(3),C(3,3),S(3,3),H(6,6),G(6)
COMMON/B1/JL(6,6),R(3,100),GF(6,100),NR
DO 5 IR=1,NR
DO 1 I=1,3
DO 1 J=1,3
C(I,J)=DCOS(Q(I)*R(J,IR))
1 S(I,J)=DSIN(Q(I)*R(J,IR))
L=1
J=2
K=3
DO 2 I=1,3
DO 3 JKKJ=1,2
H(1,L)=C(I,1)*C(J,2)*C(K,3)
H(4,L)=-C(I,1)*S(J,2)*S(K,3)
H(5,L)=-S(I,1)*C(J,2)*S(K,3)
H(6,L)=-S(I,1)*S(J,2)*C(K,3)
H(2,L)=H(1,L)
H(3,L)=H(1,L)
JP=J
J=K
K=JP
3 L=L+1
J=K
2 K=I
DO 4 J=1,6
T=0.
DO 6 L=1,6
I=JL(J,L)
6 T=T+G(I)*H(J,L)
4 GE(J,IR)=GF(J,IR)+T/W
5 CONTINUE
RETURN
END

```

C INVERSION OF A 3*3 SYMMETRIC MATRIX GIVEN IN VOIGT NOTATION
C A(6) IS THE INPUT MATRIX AND B(6) THE INVERSE

```

IMPLICIT REAL*8 (A-H,U-Z)
DIMENSION A(6),B(6)
DET= A(1)*A(2)*A(3)
1 +2.*A(4)*A(5)*A(6)
2 -A(2)*A(6)*A(6)
3 -A(2)*A(5)*A(5)
4 -A(1)*A(4)*A(4)
B(1)=(A(2)*A(3)-A(4)*A(4))/DET
B(2)=(A(1)*A(3)-A(5)*A(5))/DET
B(3)=(A(1)*A(2)-A(6)*A(6))/DET
B(4)=(A(5)*A(6)-A(1)*A(4))/DET
B(5)=(A(4)*A(6)-A(2)*A(5))/DET
B(6)=(A(4)*A(5)-A(3)*A(6))/DET
RETURN
END

```

C SUBROUTINE DYNFCCO(P,D,NP)
C MATRIZ DINAMICA PARA CIES DE FUERZA GENERALES HASTA 2DOS VECINOS EN
C FCC
C CORRESPONDENCIA CON NOTACION DE TEWARY (T.P.388) :
C 1ROS VECINOS : P1=A1, P2=A6, P3=A3
C 2DOS VECINOS : P4=B1, P5=B2

```

IMPLICIT REAL*8 (A-H,U-Z)
DIMENSION C(3),C2(3),S2(3),P(NP),Q(3),D(6)
DO 1 I=1,3
X=Q(I)/2.
C(I)=DCOS(X)
C2(I)=DCOS(X)
1 S2(I)=DSIN(X)
J=2
K=3
DO 2 I=1,3
D(I)=4.*(P(1)*(2.-C2(I)*(C2(J)+C2(K))) + P(3)*(1.-C2(J)*C2(K)))
1 +2.*(P(4)*(1.-C(I))+P(5)*(2.-C(J)-C(K)))
D(I+3)=4.*P(2)*S2(J)*S2(K)
J=K
2 K=I
RETURN
END

```

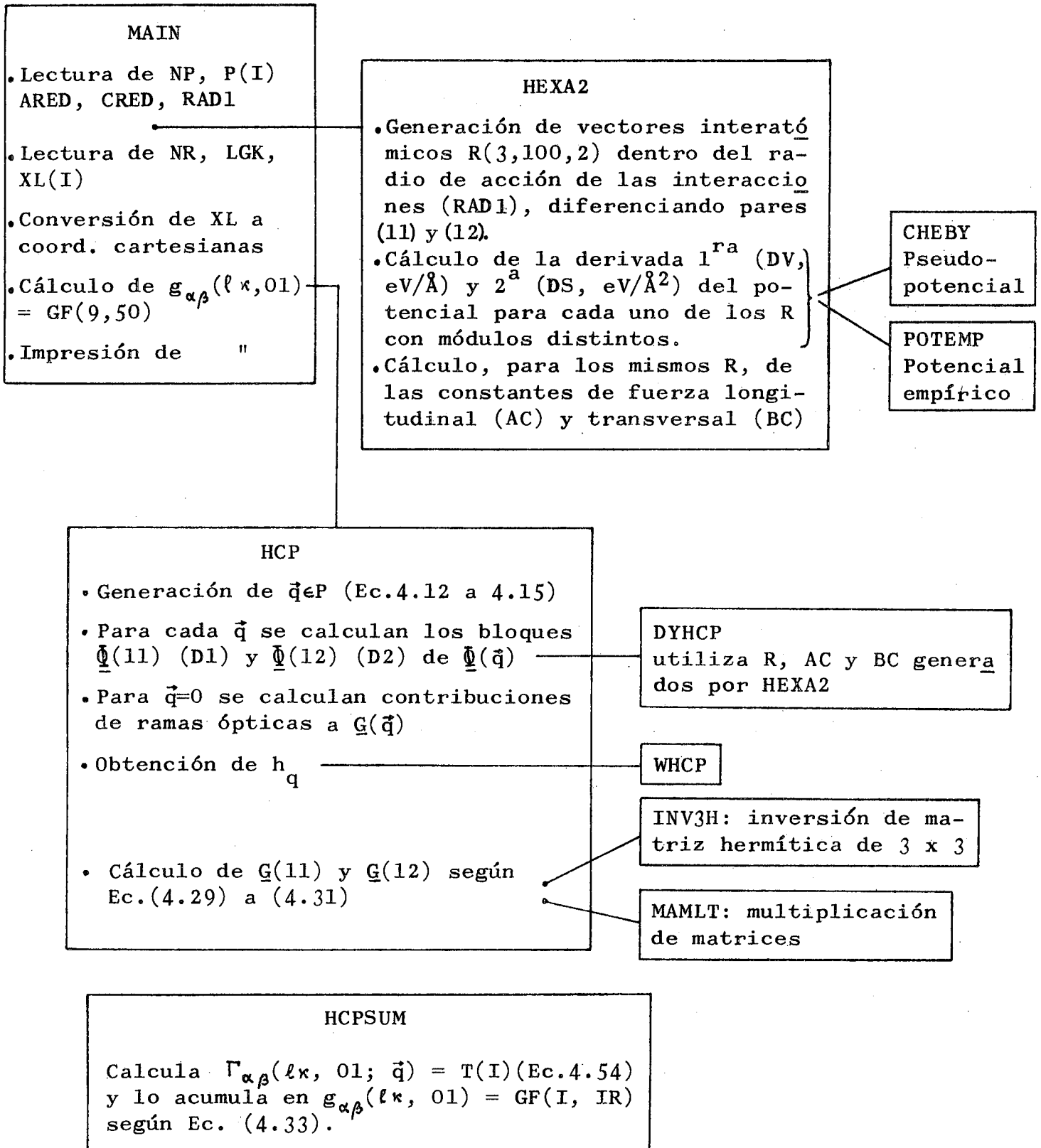
Datos para cálculo de la función de Green en Cu (fcc) con modelo de fuerzas interatómicas de Bullough y Hardy⁽⁶⁾

JL(J,L)	1	1	2	2	3	3
	2	3	3	1	1	2
	3	2	1	3	2	1
	4	4	5	5	6	6
	5	6	6	4	4	5
	6	5	4	6	5	4
\vec{r}	1: RD=		2: NR=		1: NX= 12	
	0.5		0.5		0.	
	NP= 5					
P(I)	1.5622	1.78695	-0.22475	-0.0559	0.00815	

Resultados correspondientes:

NX= 12	NQR= 239	INQ= 6911.0			
R	GXX	GYY	GZZ	GXY	GXZ
0.5	0.5	0.0	E-4 CM/DYN		
	0.48030-01	0.48030-01	0.37030-01	0.0	0.0
				TRG= 0.13310+00	0.20460-01
					tr g(\vec{r})
					g(\vec{r})

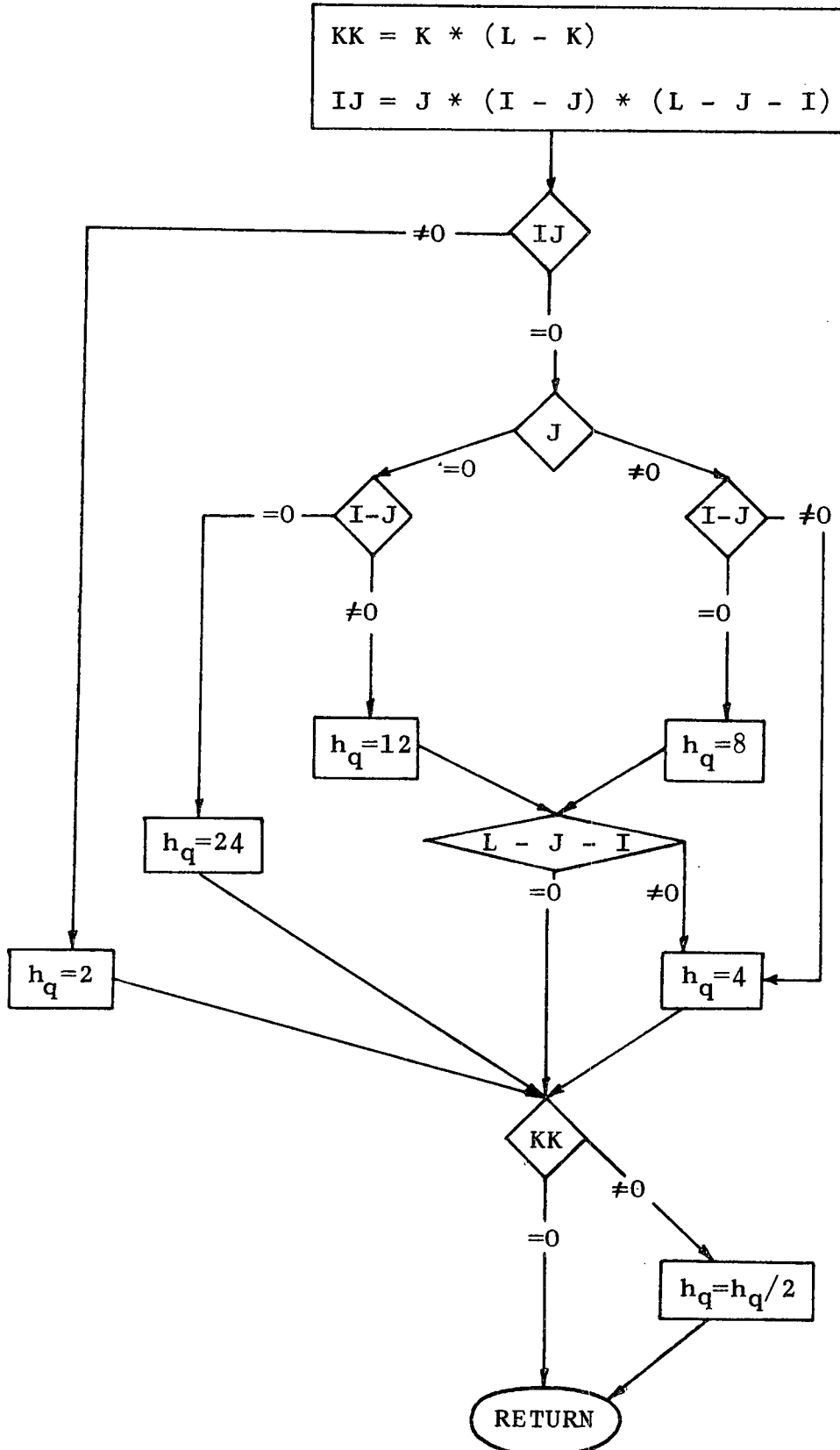
GREHEX - Cálculo de la función de Green de la red hcp



WHCP

Subrutina función para el cálculo de h_q en la red hcp.

I, J, K son los enteros que definen q y figuran en el encabezamiento de la Tabla 5. Esta Tabla se toma como base para la construcción del siguiente diagrama de flujo. En el programa se llama WHCP a h_q .



Datos de entrada de GREHEX

- NP = N° de parámetros que utiliza el programa para calcular la matriz $\underline{\Phi}(\vec{q})$.
- P(I) = Valores de dichos parámetros. Las unidades dependen de la subrutina que genere las derivadas 1^{as} y 2^{as} del potencial. Estas deben resultar en eV/Å y eV/Å², respectivamente. Para POTEMP no es necesario especificar como dato ningún parámetro, ya que éstos están definidos en la propia subrutina.
- ARED = a (Å), parámetro de red en el plano basal
- CRED = c (Å), " " " según el eje Z
- RAD1 = Radio de alcance de las interacciones consideradas (Å)
- NR = N° de posiciones atómicas para las cuales se calcula la función de Green.
- LGK = N° de subdivisiones de poliedro irreducible P en la dirección X, o sea entre Γ y K. Es el número L en las ecuaciones (4.15). En el caso de la Fig.7 vale LGK = 8. Es conveniente que LGK sea par para que los puntos \vec{q} generados incluyan al punto M
- XL(I) = Define cada posición atómica donde se ha de calcular la función de Green. XL(I), con I = 1 a 3, son las coordenadas hexagonales de la celda, es decir los números (l_1, l_2, l_3) de la Ec.(4.1). X(4) es el sitio dentro de la celda (1 o 2). El origen se considera en un sitio de tipo 1.
- R(I,L) = Posiciones atómicas donde se calculará GF, especificadas con el parámetro de red a (lado de la celda cúbica) como unidad. I = 1, 2, 3 corresponde a las componentes cartesianas x, y, z, respectivamente. L = 1, NR numera las distintas posiciones.

FILE: GREHEX FORTRAN A CNEA = CMS - REL 6. PLC 06

```

C DISCRETE GREEN FUNCTION GF(J,IR) (ANGS**2/EV) FOR THE HCP LATTICE
C J (1 TO 9) ARE THE CARTESIAN COMPONENTS IN VOIGT NOTATION, WITH 32=7,
C 31=8, 21=9. IR (1 TO NR) INITIALIZES THE ATOMIC POSITIONS WHERE GF IS
C CALCULATED. THESE ARE GIVEN AS INPUT DATA THROUGH THE HEXAGONAL CELL
C INDICES XL(1) (I=1 TO 3) AND THE SITE INDEX XL(4) (1 OR 2)
C P(I) (I=1, NP) ARE THE PARAMETERS ENTERING THE FORCE CONSTANTS
C ARED, CRED = LATTICE CONSTANTS (ANGS)
C ND IS HALF THE LENGTH, IN LATTICE CONSTANTS, OF EACH SIDE OF AN ORTO-
C RHOMBIC CRYSTAL REGION WHERE THE HCP LATTICE IS GENERATED FOR THE
C CALCULATION OF THE DYNAMICAL MATRIX IN THE CASE OF AN ARBITRARY
C CENTRAL POTENTIAL. THIS REGION MUST CONTAIN A SPHERE OF RADIUS RAD1
C RAD1 = LATTICE DISTANCE DEFINING THE RANGE OF THE INTERACTIONS (ANGS)
C LGK = NUMBER OF PARTITIONS FROM GAMMA TO K AND A IN THE HEXAGONAL
C BRILLOUIN ZONE. THIS DEFINES AN HEXAGONAL MESH FOR THE Q-SUMMATION
C IT MUST BE AN EVEN NUMBER.
C SUBROUTINE GREHCP(LGK,ND,RAD1)
C IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
C DIMENSION XL(4),XD(3)
C COMMON/A/ARED,CRED
C COMMON/B/GF(9,50),R(4,50),RT3,NR
C COMMON/C/P(20),CA,NP
C IF(LGK.NE.0)GO TO 2
C READ(5,17)NP,(P(I),I=1,NP)
C WRITE(8,17)NP,(P(I),I=1,NP)
17 FORMAT(5X,13/(8F10.6))
C READ(5,8)ND,ARED,CRED,RAU1
C 8 FORMAT(4X,12,6X,F10.6,6X,F10.6,6X,F8.4)
C WRITE(8,16)ND,ARED,CRED,RAD1
16 FORMAT(4H ND=,12,6H ARED=,F10.6,6H CRED=,F10.6,6H RAD1=,F8.4)
C CA=CRED/ARED
C RT3=DSQRT(3.00)
C 2 CONTINUE
C DO 18 I=1,3
18 XD(I)=0.
C CALL HEXA2(ND,RAD1,0.,N1,NTOT,N3,XD)
C IF (LGK . NE . 0) GO TO 10
C READ(5,1)NR, LGK
C 1 FORMAT(5X,12,5X,14)
C WRITE(8,19)
19 FORMAT(4H IR,8X,2H L,11X,2H K,22X,1HR,17X,4HRMOD)
C DO 4 IR=1,NR
C READ(5,3)XL
C 3 FORMAT(1X,3F5.0,F10.0)
C DO 7 I=1,9
C 7 GF(I,IR)=0.
C R(1,IR)=(XL(1)-XL(2))/2.
C R(2,IR)=((XL(1)+XL(2))/2.+(XL(4)-1.)/3.)*RT3
C R(3,IR)=XL(3)+(XL(4)-1.)/2.
C R(4,IR)=XL(4)
C RMOD=DSQRT( R(1,IR)**2 + R(2,IR)**2 + (R(3,IR)*CA)**2 ) * ARED
15 WRITE(8,15) IR,XL,(R(I,IR),I=1,3),RMOD
15 FORMAT(1X13,3F5.0,F8.0,5X3F9.4,F12.4)
C 4 CONTINUE
C 10 CONTINUE
C CALL HCP(LGK,NR,TNQ)
C WRITE(8,5)LGK,NR,TNQ
C 5 FORMAT(5H LGK=,13,5H NR=,15,5H TNQ=,F9.1)
C A=8./TNQ
C WRITE(8,12)
12 FORMAT(4H IR,29X,14HG (ANGS**2/EV))
C DO 6 IR=1,NR
C N=12.0001-3.*R(4,IR)
C DO 9 I=1,N
C 9 GF(I,IR)=GF(I,IR)*A
C TRG=GF(1,IR)+GF(2,IR)+GF(3,IR)
C WRITE(8,14)IR,(GF(I,IR),I=1,N),TRG
14 FORMAT(1X,13,2X,6E12.4/(42X,3E12.4))
C 6 CONTINUE
C STOP
C END
C RETURN

```

```

SUBROUTINE HCP(L,N,T)
C GENERA LOS PUNTOS Q DE LA Z.B.R. EN COORDENADAS CARTESIANAS.
C LOS IQ ESTAN DADOS EN COORDENADAS HEXAGONALES.
IMPLICIT REAL*8 (A-H,Q-Z)
DIMENSION IQ(3),Q(3),A(6,2),B(7,2)
COMPLEX*16 D1(3,3),D2(3,3),G1(3,3),G2(3,3),E(3,3)
COMMON/B/GF(9,50),R(4,50),RT3,NR
COMMON/C/P(20),CA,NP
Z=RT3*CA
ZZ=Z*Z
E1=(P(3)-P(4))/(4.+ZZ)
E2=(P(5)-P(6))/(16.+ZZ)
N=0.
T=1.
CL=6.283185/DFLOAT(L)
IM=L+1
LO=L+2
DO 3 II=1,IM
IQ(I)=II-1
JM=MINO(II,(LO-II))
DO 2 JJ=1,JM
IQ(2)=JJ-1
Q(1)=CL*((2.*DFLOAT(IQ(1))+DFLOAT(IQ(2)))/3.)
Q(2)=CL*(DFLOAT(IQ(2))/RT3)
DO1 K=1,IM
IQ(3)=K-1
Q(3)=CL*DFLOAT(IQ(3))/2.
C 30 CALL DYNHCP(Q,D1,D2,Z,ZZ,E1,E2)
C 30 CALL DYHCP(Q,D1,D2)
N=N+1
IF (N.NE.1) GO TO 5
GX=.03125/CDABS(D1(1,1))
GZ=.03125/CDABS(D1(3,3))
DO 6 IR=1,NR
SGN=3.-2.*R(4,IR)
GF(1,IR)=SGN*GX
GF(2,IR)=GF(1,IR)
6 GF(3,IR)=SGN*GZ
GO TO 1
5 CONTINUE
W=WHCP(IQ,L)
T=T+24./W
CALL INV3H(D1,G1,DETR)
IF(DETR.GT.1E-15)GO TO 32
WRITE(8,34)DETR,IQ,Q
C 34 FORMAT(F8.3,4X,3I6,6X,3F8.3)
GO TO 1
C 32 CALL MAMLTC(G1,D2,E,3,3,3)
DO 11 I=1,3
DO 11 J=1,3
11 E(I,J)=DCONJG(E(I,J))
CALL MAMLTC(D2,E,G2,3,3,3)
DO 12 I=1,3
DO 12 J=1,3
12 G2(I,J)=D1(I,J)-G2(I,J)
CALL INV3H(G2,G1,DETR)
IF(DETR.GT.1E-15)GO TO 38
WRITE(8,39)DETR,IQ,Q
C 39 FORMAT(3X,F10.3,4X,3I5,4X,3F10.6)
GO TO 1
C 38 CONTINUE
CALL MAMLTC(E,G1,G2,3,3,3)
DO4 I=1,3
LL=I
DO4 J=I,3
A(LL,1)=DREAL(G1(I,J))
B(LL,1)=DIMAG(G1(I,J))
A(LL,2)=-DREAL(G2(I,J))
B(LL,2)=-DIMAG(G2(I,J))
4 LL=8-J-I
B(7,1)=-B(6,1)
B(7,2)=-B(6,2)
CALL HCPSUM(Q,W,A,B)
1 CONTINUE
2 CONTINUE
3 CONTINUE
RETURN
END

```

```

SUBROUTINE MAMTIC(A,B,C,L,M,N)
C MULTIPLICA MATRICES COMPLEJAS. HACE EL PRODUCTO DE LAS MATRICES COMPLE-
C JAS (A*B) Y OBTIENE LA MATRIZ COMPLEJA C.
  IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
  COMPLEX*16 A,B,C
  DIMENSION A(L,M),B(M,N),C(L,N)
  DO 1 I = 1,L
  DO 1 J = 1,N
  C(I,J) = 0.0
  DO 3 K=1,M
  3 C(I,J) = C(I,J) + A(I,K)*B(K,J)
  1 CONTINUE
  RETURN
  END
FUNCTION WHCP(IQ,L)
C FUNCION QUE ASIGNA A C/PTO. UN PESO(EQUIVALE AL NUMERO DE ZUNAS QUE
C COMPARTEN IQ.
  IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
  DIMENSION IQ(3)
  I=IQ(1)
  J=IQ(2)
  K=IQ(3)
  KK=K*(L-K)
  IJ=J*(I-J)*(L-I-J)
  IF(IJ.EQ.0)GO TO 1
  WHCP=2.
  GO TO 5
  1 IF(J.NE.0)GO TO 4
  WHCP=12.
  IF((I-J).NE.0)GO TO 2
  WHCP=24.
  GO TO 5
  2 IF((L-J-I).NE.0)GO TO 3
  GO TO 5
  3 WHCP=4.
  GO TO 5
  4 WHCP=8.
  IF((I-J).EQ.0)GO TO 2
  WHCP=4.
  GO TO 5
  5 IF(KK.NE.0)GO TO 6
  RETURN
  6 WHCP=WHCP/2.
  RETURN
  END
SUBROUTINE INV3H(A,B,DETR)
C INVIERTE MATRICES DE 3*3 COMPLEJAS, HERMITICAS.
  IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
  COMPLEX*16 A(3,3),B(3,3),DETR
  DETR=A(1,1)*A(2,2)*A(3,3)
  1 -A(1,1)*A(2,3)*A(3,2)
  1 -A(1,2)*A(2,1)*A(3,3)
  1 +A(1,2)*A(2,3)*A(3,1)
  1 +A(1,3)*A(2,1)*A(3,2)
  1 -A(1,3)*A(2,2)*A(3,1)
  DETR=CDABS(DETR)
  C
  C
  IF(DETR.LT.1E-15)GO TO 2
  3 B(1,1)=(A(2,2)*A(3,3)-A(2,3)*A(3,2))/DETR
  B(2,2)=(A(1,1)*A(3,3)-A(1,3)*A(3,1))/DETR
  B(3,3)=(A(1,1)*A(2,2)-A(1,2)*A(2,1))/DETR
  B(2,3)=(A(1,3)*A(2,1)-A(1,1)*A(2,3))/DETR
  B(1,3)=(A(1,2)*A(2,3)-A(1,3)*A(2,2))/DETR
  B(1,2)=(A(1,3)*A(3,2)-A(1,2)*A(3,3))/DETR
  B(3,2)=DCONJG(B(2,3))
  B(3,1)=DCONJG(B(1,3))
  B(2,1)=DCONJG(B(1,2))
  2 CONTINUE
  RETURN
  END

```

```

SUBROUTINE HCPSUM (Q,W,A,B)
C PARA CADA Q AGRUPA EN T(IX) LOS TERMINOS EQUIVALENTES POR SIMETRIA Y
C LOS ACUMULA EN LA FUNCION DE GREEN DE LA RED DIRECTA GF(IX,IR)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
DIMENSION QQ(3,3),Q(3),QR(3,3),T(9),A(6,2),B(7,2),C(3,3),S(3,3)
COMMON/B/GF(9,50),R(4,50),RT3,NR
DO1 J=1,3
1 QQ(1,J)=Q(J)
  QQ(2,1)=0.5*(Q(1)+RT3*Q(2))
  QQ(2,2)=0.5*(3.*Q(1)-RT3*Q(2))/RT3
  QQ(2,3)=Q(3)
  QQ(3,1)=0.5*(-Q(1)+RT3*Q(2))
  QQ(3,2)=0.5*(3.*Q(1)+RT3*Q(2))/RT3
  QQ(3,3)=Q(3)
DO4 IR=1,NR
M=R(4,IR)+.0001
QR(1,3)=QQ(1,3)*R(3,IR)
C(1,3)=DCOS(QR(1,3))
S(1,3)=DSIN(QR(1,3))
DO3 I=1,3
DO3 J=1,2
  QR(I,J)=QQ(I,J)*R(I,IR)
  C(I,J)=DCOS(QR(I,J))
  S(I,J)=DSIN(QR(I,J))
3 CCP=C(2,1)*C(2,2)+C(3,1)*C(3,2)
  CCN=C(2,1)*C(2,2)-C(3,1)*C(3,2)
  CSP=C(2,1)*S(2,2)+C(3,1)*S(3,2)
  CSN=C(2,1)*S(2,2)-C(3,1)*S(3,2)
  SCP=S(2,1)*C(2,2)+S(3,1)*C(3,2)
  SCN=S(2,1)*C(2,2)-S(3,1)*C(3,2)
  SSP=S(2,1)*S(2,2)+S(3,1)*S(3,2)
  SSN=S(2,1)*S(2,2)-S(3,1)*S(3,2)
  T(1)=C(1,3) * (C(1,1)*C(1,2)*A(1,M) + .25*(A(1,M)+3.*A(2,M))*CCP
  & + .5*RT3*A(6,M)*CCN)
  T(2)=C(1,3) * (C(1,1)*C(1,2)*A(2,M) + .25*(A(2,M)+3.*A(1,M))*CCP
  & - .5*RT3*A(6,M)*CCN)
  T(3)=C(1,3) * (C(1,1)*C(1,2)+CCP)*A(3,M)
  TA4 = (.5*CSN-C(1,1)*S(1,2))*A(4,M) - .5*RT3*CSP*A(5,M)
  TA5 = (.5*SSP+S(1,1)*S(1,2))*A(5,M) - .5*RT3*SCP*A(4,M)
  TA6 = (.5*SSP+S(1,1)*S(1,2))*A(6,M) + .25*RT3*SSN*(A(2,M)-A(1,M))
  TB4 = (.5*CCP-C(1,1)*C(1,2))*B(4,M) - .5*RT3*CCN*B(5,M)
  TB5 = (.5*SSP+S(1,1)*S(1,2))*B(5,M) + .5*RT3*SSN*B(4,M)
  TB6 = (.5*SSP+S(1,1)*S(1,2))*B(6,M) + .25*RT3*SCP*(B(2,M)-B(1,M))
  & - .75*SCN*B(7,M)
  T(4)=(TA4+TB4)*S(1,3)
  T(5)=(TA5+TB5)*S(1,3)
  T(6)=(TA6+TB6)*C(1,3)
  IF(M-1) 6,6,7
6 T(7)=(TA4-TB4)*S(1,3)
  T(8)=(TA5-TB5)*S(1,3)
  T(9)=(TA6-TB6)*C(1,3)
  N=9
  GO TO 8
7 T(1)=T(1)-C(1,3)*(C(1,1)*S(1,2)*B(1,M)+.25*(B(1,M)+3.*B(2,M))*CSN
  & +.25*RT3*(B(6,M)+B(7,M))*CSP)
  T(2)=T(2)-C(1,3)*(C(1,1)*S(1,2)*B(2,M)+.25*(B(2,M)+3.*B(1,M))*CSN
  & -.25*RT3*(B(6,M)+B(7,M))*CSP)
  T(3)=T(3)-C(1,3)*(C(1,1)*S(1,2)+CSN)*B(3,M)
  N=6
8 DO 5 I=1,N
5 GF(I,IR)=GF(I,IR)+T(I)/W
4 CONTINUE
  RETURN
  END

```

```

SUBROUTINE DYHCP(Q,D1,D2)
C MATRIZ DINAMICA (EV/ANGS**2) DE LA RED HCP PARA CUALQUIER POTENCIAL
  IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
  DIMENSION Q(3)
  COMPLEX*16 D1(3,3),D2(3,3),D(3,3,2),QR,ZC
  COMMON/A/ARED,CRED
  COMMON/O/R(3,100,2),M(2),AC(50,2),BC(50,2)
  DO4 K=1,2
  DO6 I=1,3
  DO6 J=1,3
  6 D(I,J,K)=0.
  N=M(K)
  DO3 MK=1,N
  QR=(Q(1)*R(1,MK,K)+Q(2)*R(2,MK,K))/ARED+Q(3)*R(3,MK,K)/CRED
  QRC=DCMPLX(0.DO,QR)
  ZC=CDEXP(QRC)
  DO1 I=1,3
  FI=-BC(MK,K)
  DO 2 J=1,3
C MATRIZ DE CONSTANTES DE FUERZA.
  FI=FI-R(1,MK,K)*R(J,MK,K)*AC(MK,K)
C SU TRANSFORMADA
  D(I,J,K)=D(I,J,K)+FI*ZC
  D(I,J,1)=D(I,J,1)-FI
  2 FI = 0.
  1 CONTINUE
  3 CONTINUE
  4 CONTINUE
  DO5 I=1,3
  DO5 J=1,3
  D1(I,J)=D(I,J,1)
  5 D2(I,J)=D(I,J,2)
  D1(2,1)=DCONJG(D1(1,2))
  D1(3,1)=DCONJG(D1(1,3))
  D1(3,2)=DCONJG(D1(2,3))
  D2(2,1)=D2(1,2)
  D2(3,1)=D2(1,3)
  D2(3,2)=D2(2,3)
  RETURN
  END
SUBROUTINE HEXA2(ND,RAD1,DIST,N1,NTOT,N3,XD)
C GENERA Y ORDENA EN FORMA CRECIENTE POR MODULOS, LOS VECTORES
C POSICION DE LOS ATOMOS DE UNA RED HCP, REFERIDOS AL PUNTO DE
C COORDENADAS XD(1),XD(2),XD(3).
  IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
  DIMENSION X1(3),X2(3),VAUX(3),XD(3),X(3,220),XX(220)
  COMMON/A/ARED,CRED
  COMMON/C/P(20),CA,NP
  COMMON/O/R(3,100,2),M(2),AC(50,2),BC(50,2)
C CUIDADG RF=KFERMI Y DEPENDE DEL MATERIAL.
  RF=1.365
  POT95=34.4478
  FASE=-16.77
  DO 100 I=1,3
  100 XD(I)=0.
  N=1
  II=0
  DO 20 LL1=II,ND
  LI=LL1-ND/2
  DO 20 LL2=II,ND
  L2=LL2-ND/2
  DO 20 LL3=II,ND
  L3=LL3-ND/2
  X1(1)=(LI+.5*L2)*ARED -XD(1)
  X1(2)=.5*DSQRT(3.DO)*L2*ARED -XD(2)
  X1(3)=L3*CRED -XD(3)
C
  XX1=DSQRT(X1(1)**2+X1(2)**2+X1(3)**2)
  IF(XX1-(RAD1+2*DIST)) 5,5,10
  5 X(1,N)=X1(1)
  X(2,N)=X1(2)
  X(3,N)=X1(3)
  XX(N)=XX1
  N=N+1
  10 X2(1)=X1(1)+.5*ARED
  X2(2)=X1(2)+(.5/DSQRT(3.DO))*ARED
  X2(3)=X1(3)+.5*CRED
C
  XX2=DSQRT(X2(1)**2+X2(2)**2+X2(3)**2)

```

```

15 IF (XX2-(RAD1+2*DIST)) 15,15,20
X(1,N)=X2(1)
X(2,N)=X2(2)
X(3,N)=X2(3)
XX(N)=XX2
N=N+1
20 CONTINUE
1 FORMAT (5X, I5, 4F10.5)
N3=N-1
N1=0
NTOT=0
DO 50 K=2,N3
N=N3+2-K
DO 40 J=2,N
VAUC=XX(J)
DO 25 I=1,3
25 VAUX(I)=X(I,J)
IF (XX(J-1)-XX(J)) 40,40,30
30 XX(J)=XX(J-1)
XX(J-1)=VAUC
DO 35 I=1,3
X(I,J)=X(I,J-1)
35 X(I,J-1)=VAUX(I)
40 CONTINUE
IF (XX(N).GT.(RAD1+DIST)) GO TO 50
IF (NTOT.EQ.0) NTOT=N
IF (XX(N).GT.RAD1) GO TO 50
IF (N1.EQ.0) N1=N
50 CONTINUE
M(1)=0.
M(2)=0.
RMOD=0.
DO 2 I=2,N1
IK=2*(DABS(X(3,I))+0.001)/CRED
IP=IK/2
IK=(IP*2)-IK
IF (IK.NE.0) GO TO 44
M(1)=M(1)+1
K=1
GO TO 4
44 K=2
M(2)=M(2)+1
4 MK=M(K)
DO 3 J=1,3
3 R(J,MK,K)=-X(J,I)
IF (XX(I)-RMOD.LE.0.00001) GO TO 24
RMOD=XX(I)
C SI LLAMA A CHEBY OBTIENE LA DERIVADA PRIMERA Y SEGUNDA DEL PSEUDOPOT.
C SI LLAMA A PTEMP OBTIENE LA DERIVADA PRIMERA Y SEGUNDA DEL POTENCIAL
C EMPIRICO.
CALL CHEBY(P,RMOD,RF,POT95,FASE,POT,DP,DS,RAD1)
CALL PTEMP(I,DP,DS)
24 BC(MK,K)=DP/RMOD
AC(MK,K)=(DS-BC(MK,K))/(RMOD**2)
C WRITE(6,88)(R(J,MK,K),J=1,3),RR(MK,K),DP,DS
88 FORMAT (3H R=,3F12.6,4H RR=,F8.4,4H DP=,F10.6,4H DS=,F10.6)
2 CONTINUE
RETURN
END
SUBROUTINE CHEBY(A,R,KF,POT95,FASE,POT,DP,DS,DIST)
C SUMA 17 COEFICIENTES DE CHEBYSHEV A EN EL PUNTO R
C CALCULA DERIVADAS PRIMERA DP(EV/ANGS) Y 2DA (EV/ANGS**2) DEL POTENCIAL
C KF(1/ANGS) = VECTOR DE ONDA DE FERMI DEL MATERIAL
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
REAL*8 KF
DIMENSION A(17),CH(17),DPCH(17),DSCH(17)
POT=0.0
DP=0.0
DS=0.0
IF (R.GT.DIST) GO TO 8
FREC=2*KF
XR=.25*KF*R-1.5
C SI XR ES MENOR QUE -1 SIGO USANDO EL DESARROLLO DE CHEBY
IF (XR+1.) 1,1,2
1 CONTINUE
C WRITE(6,3) R
3 FORMAT (5X, 'DOS ATOMOS SE ACERCAN A',F8.4)
GO TO 4
2 IF (XR-.95) 4,4,5

```

```
5 ARG=FREC*R+FASE
  POT=POT95*DSIN(ARG)/(R**5)
  DP =POT95*(-5*DSIN(ARG)/(R**6)+FREC*DCOS(ARG)/(R**5))
  DS=POT95*(DSIN(ARG)*(30./(R**7)-(FREC**2)/(R**5))-10*FREC*DCOS(ARG)
  1 )/(R**6))
  GO TO 8
4 CH(1)=1.0
  CH(2)=XR
  DPCH(1)=0.0
  DPCH(2)=1.0
  DSCH(1)=0.0
  DSCH(2)=0.0
  POT=.5*A(1)*CH(1) +A(2)*CH(2)
  DP=A(2)*DPCH(2)
  DS=0.0
  DO 7 J=3,17
  CH(J)=2*XR*CH(J-1) -CH(J-2)
  DPCH(J)=2*CH(J-1) +2*XR*DPCH(J-1) -DPCH(J-2)
  DSCH(J)=4*DPCH(J-1) +2*XR*DSCH(J-1) -DSCH(J-2)
  POT=POT+A(J)*CH(J)
  DP=DP+A(J)*DPCH(J)
  DS=DS+A(J)*DSCH(J)
C PASO A EV Y ANGSTROM
6 POT=27.1946*POT
  DP=27.1946*(.25*KF)*DP
  DS=27.1946*(.25*KF)**2)*DS
8 CONTINUE
  RETURN
  END
SUBROUTINE PTEMP(I,DP,DS)
C ASIGNA A CADA VECINO LA DERIVADA PRIMERA, DP (EV/ANGS), Y SEGUNDA, DS
C (EV/ANGS**2) DEL POT. EMPIRICO. A LOS 12 PRIMEROS VECINOS (I=2-13)
C CORRESPONDE UNA CUBICA Y A LOS SIGUIENTES (I=14-19) OTRA CUBICA.
C I=1 CORRESPONDE AL ATOMO ORIGEN
  IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
  IF(I-13)3,3,4
3 DP=0.0192
  DS=0.6872
  GO TO 6
4 DP=-0.0844
  DS= 0.0655
6 CONTINUE
  RETURN
  END
FUNCTION DREAL(A)
  COMPLEX*16 C,A
  REAL*8 Z(2),DREAL
  EQUIVALENCE (C,Z)
  C=A
  DREAL=Z(1)
  RETURN
  END
FUNCTION DIMAG(A)
  COMPLEX*16 C,A
  REAL*8 Z(2),DIMAG
  EQUIVALENCE (C,Z)
  C=A
  DIMAG=Z(2)
  RETURN
  END
```

Datos para cálculo de la función de Green en Mg con interacciones dadas por un potencial empírico y un pseudopotencial (7).

a) Potencial empírico:

```

NP= 1,          PUIEMP
ND= 2,ARED= 3.2094 ,CRED= 5.240927 ,RADI= 4.7 , POT EMP
NR= 3,LGK= 10,
  0. 0. 0. 2.
  1. 0. 0. 1.
  0. 0. 0. 1.
    
```

(l_1 l_2 l_3 , κ) posición atómica donde se calculará la función de Green, tomando (000,1) como origen

b) Pseudopotencial:

```

NP= 17,          PSEUDOPOTENCIAL
0.101279 -0.095263 0.079219 -0.057676 0.035908 -0.018184 0.006731 -0.001578
0.000277 -0.000159 0.000124 -0.000068 0.000029 -0.000009 0.000001 0.000002
-0.000002
ND= 6,ARED= 3.2094 ,CRED= 5.2111 ,RADI= 6.419 , PSEUDOPOT.
NR= 3,LGK= 10,
  0. 0. 0. 2.
  1. 0. 0. 1.
  0. 0. 0. 1.
    
```

Resultados obtenidos con el potencial empírico:

0.0									
ND= 2	ARED=	3.209400	CRED=	5.240927	RADI=	4.7000			
IR	L		K		R				RMOD
1	0.	0.	0.	0.0	0.5774	0.5000			3.2094
2	1.	0.	1.	0.5000	0.8660	0.0			3.2094
3	0.	0.	1.	0.0	0.0	1.0000			5.2409
LGK= 10	NQR=	396	TNQ=	6000.0					
IR			G (ANGS**2/EV)						
1	0.11040+00	0.15430+00	0.17000+00	0.40360-01	0.0	0.0			0.0
2	0.14360+00	0.18950+00	0.10460+00	0.0	0.0	0.0			0.38550-01
3	0.68710-01	0.68710-01	0.10110+00	0.0	0.43780+00	0.0			0.40910-01
					0.0	0.0			0.0
					0.23860+00	0.0			0.0

L es el vector $\vec{r} = (l_1, l_2, l_3)$ y K es κ . R es el vector $\vec{r}(l\kappa, 01)$ en coordenadas cartesianas y RMOD su módulo.

NQR es el número de puntos \vec{q} en el poliedro irreducible P.

TNQ es el número total de puntos en la ZB.

Bajo el título G(ANGS**2/EV) se da, para cada $(l\kappa)$, la matriz de Green $\mathcal{G}_{\alpha\beta}(l\kappa, 01)$ y su traza $\text{tr } \mathcal{G}$, en $\text{Å}^2/\text{eV}$, ordenadas de la siguiente forma:

$$\begin{array}{ccccccc}
 \mathcal{G}_{xx} & & \mathcal{G}_{yy} & & \mathcal{G}_{zz} & & \mathcal{G}_{yz} & & \mathcal{G}_{xz} & & \mathcal{G}_{xy} \\
 & & & & & & \mathcal{G}_{zy} & & \mathcal{G}_{zx} & & \mathcal{G}_{yx} \\
 & & & & & & \text{tr } \mathcal{G} & & & &
 \end{array}$$

Cuando $\kappa = 2$ no se escribe la 2a de estas líneas, ya que en ese caso $\mathcal{G}_{\alpha\beta} = \mathcal{G}_{\beta\alpha}$.

REFERENCIAS:

1. V.K.Tewary : Adv. Phys. 22 , 757 (1973)
2. A.A.Maradudin, E.W.Montroll, G.H.Weiss y I.P.Ipatova: Sol. State Phys. - Sup. 3 (2° Ed., 1971), Cap. 2.
3. Ibid. 2, Cap. 3.
4. C.Kittel: "Introduction to Solid State Physics" (5th ed, J. Wiley, 1976).
5. J. L. Warren : Rev. Mod. Phys. 40 , 38 (1968).
6. R. Bullough y J.R. Hardy: Phil.Mag. 17, 833 (1968).
7. C.N. Tomé, A.M. Monti y E.J. Savino: Phys.Stat.Sol.(b) 92,323 (1979)