

Estructura electrónica de aleaciones binarias en CPA

J.R. Martínez*, G. Muñiz**, G. Ortega**
C. Peña, F. Ruiz y J. Urías

*Instituto de Física "Manuel Sandoval Vallarta",
Universidad Autónoma de San Luis Potosí, 78000, San Luis Potosí, SLP, México*
(Recibido el 5 de septiembre de 1988; aceptado el 4 de mayo de 1989)

Resumen. Se ilustra la aproximación del potencial coherente (CPA) para el cálculo de la función de Green promedio de sistemas desordenados, utilizando como ejemplo una aleación binaria desordenada con elementos genéricos A y B . La estructura electrónica es descrita por un hamiltoniano de enlace fuerte en el que sólo los términos de energía orbital de las especies son diferentes. Se discuten las diferentes soluciones a las ecuaciones de CPA, utilizando una banda de estados tipo Hubbard, se muestran densidades de estados típicas y se estudia el comportamiento del espectro electrónico en función de los parámetros que caracterizan la aleación.

PACS: 01.50.Kw; 71.25.Cx

1. Introducción

Una descripción detallada de cualquier sistema desordenado involucra una cantidad tan grande de parámetros que resulta inútil tanto para fines prácticos como de fundamento. En estos casos es conveniente describir el desorden a través de funciones de distribución [1] con las cuales calcular cantidades físicas promedio. Por lo general los promedios son los relevantes, aunque en algunas ocasiones las fluctuaciones son más importantes, por ejemplo, en algunos sistemas cuasi-unidimensionales [2]. En la física del estado sólido las funciones de Green están relacionadas de manera más o menos directa con cantidades medibles [2] y su uso se ha extendido a la solución de una gran variedad de problemas que involucran desorden. Actualmente, excepto quizá por el método del grupo de renormalización [3] (cuando se puede utilizar), la aproximación del potencial coherente (CPA) se reconoce como la mejor aproximación [4], cuando ésta es aplicable, para calcular cantidades físicas promedio de sistemas desordenados.

En CPA, aproximación desarrollada a partir de la teoría de dispersión múltiple [5] para sistemas desordenados [6], se construye la función de Green como una sucesión de dispersiones elementales debidas al desorden promediadas con la función de distribución adecuada (por ejemplo, funciones de distribución atómica).

Taylor [7] y Soven [8], quienes introdujeron la aproximación del potencial co-

*En receso sabático de la Facultad de Ciencias, UASLP.

**Becarios del CONACYT.

herente (CPA), describen la aproximación como un medio efectivo en el que un dispersor embebido en él no tiene ningún efecto dispersor. La elección del medio efectivo es en principio única, pero en la práctica se introduce un potencial cuyos parámetros se fijan de manera autoconsistente (semejante a un método variacional [9]). La condición física correspondiente a esta elección es simplemente que un dispersor embebido en este medio no producirá ningún efecto en el promedio de las cantidades físicas, por ejemplo, en la función de Green promedio, pues esos efectos ya han sido incluidos en el medio efectivo. El hamiltoniano efectivo en cuestión debe ser considerado como una incógnita del problema. La elección autoconsistente del hamiltoniano es la óptima entre todas las aproximaciones de un sólo sitio [4] (CPA, aproximación del cristal virtual [10] (VCA) y la aproximación del promedio de la matriz-T (ATA) [11]).

Una ventaja de utilizar el método de funciones de Green es que cualquiera que sea la naturaleza del sistema, el problema puede permanecer en la misma forma matemática y cantidades físicas distintas, pero matemáticamente equivalentes, mostrarán las mismas características [2]. Entonces, las densidades de estados de las siguientes excitaciones tienen muchas características en común:

- i) electrones en aleaciones,
- ii) electrones en semiconductores amorfos,
- iii) fonones en sólidos desordenados y amorfos,
- iv) magnones en magnetos y antiferromagnetos desordenados.

En el presente artículo se ilustra la aplicación del método CPA a sistemas desordenados utilizando una aleación binaria con elementos genéricos A y B . Se usa un esquema de combinación lineal de orbitales atómicos [12] en el que los elementos A y B se distinguen tan solo por su energía electrónica orbital $e(A)$ y $e(B)$, respectivamente. Suponemos además que los elementos puros tienen una estructura electrónica con una densidad de estados de una sola banda del tipo de Hubbard [13].

En la Sección 2 hacemos una presentación formal del método CPA, se describe el modelo para la aleación y la aplicación a éste de CPA. En la Sección 3 se discute el tipo de soluciones de la condición de autoconsistencia según los parámetros (x, δ) , donde x es la fracción atómica de elementos A y $\delta = e(A) - e(B)$, así como el comportamiento del espectro electrónico en función de x y δ . En la misma Sección 3 se discuten los resultados y se presentan algunas conclusiones.

2. La aproximación del potencial coherente

a) El formalismo

En esta sección presentamos una descripción formal de la aproximación del potencial coherente. Para tener en mente un ejemplo particular, consideramos una aleación binaria de elementos A y B distribuidos completamente al azar en todos los nodos de una red cristalina perfecta. Para cada una de las configuraciones en que los átomos A y B pueden ser acomodados en la red cristalina existe un hamiltoniano

H para describir las excitaciones. Suponemos que a través de alguna combinatoria de las configuraciones atómicas de la aleación es posible construir una distribución estadística [1] $P(\alpha)$, función de un conjunto de parámetros α , que consideraremos como variables aleatorias. H es entonces una función de las variables aleatorias α : $H(\alpha)$. En el caso de la aleación binaria las variables aleatorias podrían ser los índices de ocupación de los nodos de la red. Entre las cantidades promedio, calculadas mediante $P(\alpha)$, se encuentran las concentraciones atómicas de los elementos A y B : x y y ($= 1 - x$), respectivamente.

Si no se incluyen efectos de muchos cuerpos [14] en H , la función de Green correspondiente se define como

$$G(z) = (z - H(\alpha))^{-1}, \quad (1)$$

y a partir del promedio de $G(z)$,

$$\langle G(z) \rangle = \int d\alpha G(z) P(\alpha), \quad (2)$$

se determinan todas las cantidades macroscópicas de interés. Los interesados en aprender cómo se hace esto, pueden consultar las Refs. [2] y [10].

El punto de partida de CPA es suponer que si de alguna manera se obtiene $\langle G(z) \rangle$, entonces es posible definir un hamiltoniano efectivo por medio de la ecuación

$$\langle G(z) \rangle = (z - H_{\text{ef}})^{-1}, \quad (3)$$

que representaría a un medio homogéneo cuyo comportamiento sería el comportamiento promedio del sistema desordenado descrito por H . Aquí es conveniente recordar que $H_{\text{ef}} \neq \langle H \rangle$ y que $\langle G \rangle$ es más importante que $\langle H \rangle$ (cf. Ec. (2) y el párrafo siguiente). De la definición (3) es evidente que H_{ef} depende de $\langle G(z) \rangle$ y es por lo tanto una función de z . En realidad la función de Green no es conocida y la Ec. (3) será utilizada para establecer tan sólo una relación de autoconsistencia de la siguiente manera. El hamiltoniano H lo escribimos en la forma

$$H = H_{\text{ef}} + (H - H_{\text{ef}}) = H_{\text{ef}} + \Sigma(z), \quad (4)$$

y expresamos la función de Green G en términos de $\langle G \rangle$ mediante una ecuación de Dyson [15]

$$G = \langle G \rangle + \langle G \rangle \Sigma(z) G. \quad (5)$$

En la Ec. (5) la autoenergía $\Sigma(z)$ depende de $\langle G \rangle$ y por autoconsistencia debe cumplirse que $\langle \Sigma(z) G \rangle = 0$. Esta condición de autoconsistencia se expresa más cómodamente en términos de la matriz T , definida mediante la ecuación

$$G = \langle G \rangle + \langle G \rangle T \langle G \rangle. \quad (6)$$

La matriz T también es una función de $\langle G \rangle$ y la condición de autoconsistencia corresponde sencillamente a

$$\langle T \rangle = 0, \tag{7}$$

que en principio debe ser resuelta para obtener $\langle G \rangle$. Si pudiéramos resolver la Ec. (7) exactamente, el problema estaría resuelto sin ninguna aproximación de por medio. Sin embargo, excepto en casos especiales y triviales, esto no se puede hacer ya que T es una matriz y la Ec. (7) representa en realidad un conjunto de ecuaciones: una por cada elemento de la matriz T , en donde las incógnitas son todos los elementos de matriz de $\langle G(z) \rangle$. Lo que se hace en la práctica es parametrizar H_{ef} y resolver la Ec. (7) para los parámetros como funciones de z . La forma usual es suponer que H_{ef} es la suma de un término "puro" (homogéneo y sin desorden) y de una autoenergía que es la que queda por determinar. Esto es lo que haremos para una aleación binaria desordenada.

b) El caso de una aleación binaria

Para describir la parte electrónica de la aleación consideramos la aproximación de amarre fuerte [12], con un solo orbital atómico en cada sitio. El hamiltoniano del sistema es

$$H = \frac{\delta}{2} \sum_n \sigma_n a_n^\dagger a_n + \sum_{n,m} t_{nm} a_n^\dagger a_m, \tag{8}$$

en donde a_n aniquila un electrón del orbital localizado en el nodo n de la red y σ_n es el índice de ocupación del mismo nodo n . Además, σ toma el valor $+1$ (-1) si el nodo está ocupado por un átomo del tipo A (B). El índice de ocupación σ es la única variable aleatoria del problema con una función de distribución

$$P(\sigma) = x\delta(\sigma - 1) + y\delta(\sigma + 1), \quad (0 \leq x, y \leq 1) \tag{9}$$

de manera que la fracción promedio de nodos de la red ocupados por átomos del tipo A es $x = (\langle \sigma \rangle + 1)/2$. El parámetro δ en la Ec. (8) es la diferencia de energía entre los orbitales atómicos de las especies A y B , y t_{mn} son las integrales de traslape, que las consideramos independientes de la composición de la aleación. El hamiltoniano en la Ec. (8) se eligió debido a que facilita los cálculos permitiendo una presentación clara de la aproximación CPA. Sin embargo, tiene las fallas propias de la aproximación de amarre fuerte [12]. Además, hay que reconocer que el suponer que el desorden afecta tan sólo a la parte diagonal, desde el punto de vista físico, es una aproximación cruda.

Para calcular $\langle G \rangle$ en CPA, tal como se describió en la sección anterior, proponemos a continuación una forma de parametrizar H_{ef} . Considerando que la estructura cristalina no cambia con la composición, es posible obtener resultados satisfactorios para la función de Green promedio si se considera que H_{ef} es diagonal en la

representación de Bloch [12]

$$\langle k | H_{\text{ef}}(z) | k' \rangle = (S(k) + \Sigma(k, z)) \delta_{kk'}. \quad (10)$$

$S(k)$ en la Ec. (10) es la dispersión de los estados electrónicos para el sólido homogéneo.

Para el hamiltoniano de la Ec. (8), el sólido homogéneo sería uno de amarre fuerte [16] con elementos de matriz en la representación de Bloch dados por $S(k)\delta_{kk'}$ y con una función de Green asociada

$$G_{kk'}^0(z) = (z - S(k))^{-1} \delta_{kk'}.$$

Todos los efectos del desorden quedan contenidos en $\Sigma(k, z)$, que por lo pronto es un parámetro desconocido. La relación entre $\langle G \rangle$ y Σ es dada por la Ec. (3)

$$\begin{aligned} \langle G_{kk'}(z) \rangle &= (z - S(k) + \Sigma(k, z))^{-1} \delta_{kk'}, \\ &= ((z - \Sigma(k, z)) - S(k))^{-1} \delta_{kk'}, \\ &= G_{kk'}^0(z - \Sigma), \end{aligned} \quad (11)$$

siendo $G^0(z)$ la función de Green de un medio puro (*i.e.*, no desordenado) en el que la dispersión de los estados es precisamente $S(k)$. En nuestro caso G^0 es la función de Green correspondiente a un hamiltoniano de amarre fuerte puro, que es fácilmente diagonalizable, pero que conduce a integrales del tipo elíptico [16]. Puesto que nuestro interés es ilustrar la aplicación de la aproximación CPA y con el fin de mantener el problema manejable analíticamente usaremos una forma de Hubbard para la función de Green del medio homogéneo

$$G_{ii}^0(z) = 2 \left[z - \sqrt{z^2 - 1} \right] \quad (12)$$

Sin embargo, hay que recordar que lo correcto hubiera sido utilizar la función de Green de amarre fuerte adecuada [16] a la estructura cristalina considerada. La Ec. (12) es una función de la variable compleja z sencilla pero con todas las propiedades analíticas de una función de Green [16]. La unidad de energía queda implícitamente definida en la Ec. (12) como el semiancho de la banda de estados. Aquí es conveniente enfatizar que, dada la dificultad de resolver la condición de autoconsistencia en forma matricial, Ec. (7), CPA requiere siempre como punto de partida una parametrización de H_{ef} , o lo que es lo mismo, una función de Green parametrizada para el medio efectivo. En el caso de desorden sustitucional [1] la existencia de una red cristalina nos sirve de argumento para proponer que en el medio efectivo el hamiltoniano sea diagonal en la representación de Bloch, Ec. (10). Esta es ya una suposición muy fuerte, especialmente para sólidos con desorden estructural [1], que descarta de entrada soluciones a la Ec. (7) con estados localizados.

Otra simplificación al problema es suponer que los efectos de dispersión generados por el desorden son en promedio independientes de k , esto es, supondremos que la autoenergía es sólo una función de z : $\Sigma(z)$. Lo usual [4,8,10] es justificar esta aproximación diciendo que el desorden, en la representación de orbitales localizados, Ec. (8), afecta solamente los términos diagonales de H y es natural entonces que, en la misma representación, Σ tenga únicamente elementos diagonales, es decir, que sea independiente de k . Con todas estas consideraciones, $H - H_{ef}$ en la Ec. (4) es simplemente

$$H - H_{ef} = \sum_n \left(\frac{\sigma_n \delta}{2} - \Sigma(z) \right) a_n^\dagger a_n. \tag{13}$$

Es con esa "perturbación" que se calcula la matriz T en el medio efectivo, definida en la Ec. (6). Un cálculo sencillo [17] da para T_{ij}

$$T_{ij} = \frac{\sigma_i \delta / 2 - \Sigma}{1 - (\sigma_i \delta / 2 - \Sigma) G^0(z - \Sigma)} \delta_{ij}. \tag{14}$$

Sustituyendo la Ec. (14) en la Ec. (7) y usando la función de distribución (9), obtenemos la condición de autoconsistencia para $\Sigma(z)$:

$$\frac{x(\delta/2 - \Sigma)}{1 - (\delta/2 - \Sigma) G^0(z - \Sigma)} - \frac{y(\delta/2 + \Sigma)}{1 + (\delta/2 + \Sigma) G^0(z - \Sigma)} = 0. \tag{15}$$

Utilizando para $G^0(z - \Sigma)$ la forma de Hubbard dada en la Ec. (12) se obtiene una ecuación de tercer grado para Σ :

$$(z + \epsilon)\Sigma^3 - \left(z\epsilon + \frac{\delta^2 - 1}{4} \right) \Sigma^2 - \left(\delta^2 \frac{z + \epsilon}{4} + \frac{\epsilon}{2} \right) \Sigma + \frac{\delta^2 \left(z\epsilon + \frac{\delta^2}{4} \right) + \epsilon}{4} = 0, \tag{16}$$

donde ϵ es el promedio de la energía de los orbitales de A y B , $\epsilon = \delta(x - y)/2$. Alternativamente, la condición de autoconsistencia puede escribirse directamente para el promedio de la función de Green [Ecs. (11) y (12)]

$$\frac{\langle G \rangle^3}{16} - \frac{z \langle G \rangle^2}{2} + \left(z^2 - \frac{\delta^2 - 1}{4} \right) \langle G \rangle - (z + \epsilon) = 0. \tag{17}$$

A partir de aquí el problema numérico es bastante sencillo y la densidad de estados promedio se obtiene usando la ecuación

$$\rho(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \langle G(\omega + i0) \rangle. \tag{18}$$

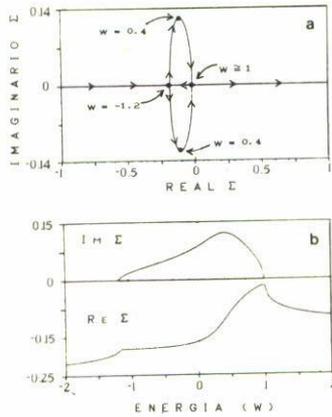


FIGURA 1. (a) Soluciones de la Ec. (16) representadas en el plano complejo ω^* . Nótese que para $\omega > 1$ una de las soluciones tiene el punto de bifurcación $\omega = -1.2$ como punto de acumulación. (b) Parte real y parte imaginaria de Σ en función de la variable espectral ω . Ambas para $(x, \delta) = (0.25, 0.5)$.

3. Resultados

En vista de la Ec. (11), el resultado de CPA para la función de Green promedio no es otra cosa más que la función de Green del sistema puro, G^0 , en la que la variable espectral ω ha sido reemplazada por la variable

$$\omega^* = \omega - \Sigma(\omega). \tag{19}$$

La función $\Sigma(\omega)$ en la transformación Ec. (19) es solución de la ecuación cúbica Ec. (16). Es conveniente recordar que la autoenergía $\Sigma(\omega)$ tiene una parte real y una imaginaria y, aunque ω sea real, ω^* es una variable compleja. La Ec. (16) la resolvimos numéricamente por el método de Laguerre. Hay tres raíces para la Ec. (16), que pueden ser tres raíces reales o bien una raíz real y dos complejas. Cada una de estas raíces define una transformación $\omega \rightarrow \omega^*$ diferente, que pueden representarse como trayectorias en el plano complejo ω^* . De todas las trayectorias posibles, las correspondientes a valores reales de z son de interés particular; estas trayectorias están dadas por la condición

$$\text{Im } \omega = 0, \tag{20}$$

es decir,

$$\text{Im } \omega^* = -\text{Im } \Sigma(\omega). \tag{21}$$

En la Fig. 1 se muestran las trayectorias de la Ec. (3) correspondientes a las dos raíces del polinomio (16) que producen valores complejos para $\Sigma(\omega)$ (para los

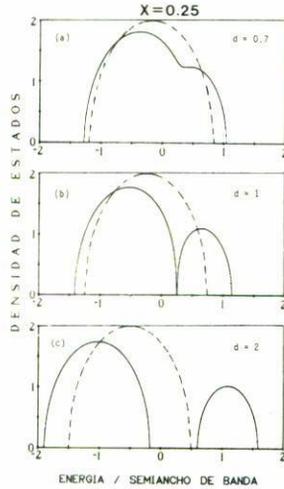


FIGURA 2. Densidad de estados para $x = 0.25$ y valores del parámetro δ de (a): $\delta = 0.7$, (b): $\delta = 1.0$ y (c): $\delta = 2.0$. Las líneas a trazos corresponden a la densidad de estados calculada en la aproximación VCA.

valores $x = 0.25$ y $\delta = 0.5$). Una de las trayectorias corresponde a $\text{Im} \Sigma > 0$, la cual tiene un valor máximo para $\omega = 0.4$ y para un valor de ω alrededor de $\omega = 1$ regresa al eje real. La segunda trayectoria es similar a la anterior, excepto que ahora con $\text{Im} \Sigma < 0$, su valor mínimo corresponde también a $\omega = 0.4$. Hay una tercer trayectoria, no mostrada en la Fig. 1 con $\text{Im} \Sigma(\omega)$ siempre igual a cero. De todas estas trayectorias las que nos interesan son aquellas que satisfacen las condiciones:

- i) $\text{Im} \Sigma(\omega) \neq 0$; lo que nos asegura tener densidades de estado diferentes de cero.
- ii) $\rho(\omega) > 0$
- iii) $\langle G(\omega) \rangle \rightarrow 0$ conforme $\omega \rightarrow \pm\infty$, o bien $\Sigma(\omega) \rightarrow \epsilon$ conforme $\omega \rightarrow \pm\infty$.

Con estas condiciones podemos seleccionar adecuadamente las trayectorias y obtener la parte real y la parte imaginaria de Σ en función de la variable espectral ω , las cuales se muestran en la Fig. 1b para una concentración de 0.25 y un valor del parámetro δ de 0.5.

En general, este es el procedimiento a seguir, sobre todo cuando no se tiene una expresión analítica para G^0 como función de ω . En nuestro ejemplo G^0 tiene una forma analítica sencilla, Ec. (12), y por eso fue posible obtener una ecuación para $\langle G \rangle$, Ec. (17), aunque éste no es siempre el caso. En la Fig. 2 se muestran resultados para las densidades de estados calculadas para una concentración de 0.25 y valores del parámetro δ de: a) $\delta = 0.7$ b) $\delta = 1.0$ y c) $\delta = 2.0$. En ellas se observa que para valores pequeños del parámetro δ se obtiene una sola banda de estados. Esto se debe, de acuerdo con la Ec. (8), a que la diferencia entre los niveles atómicos $\epsilon(A)$ y $\epsilon(B)$, δ , es pequeña produciendo una fuerte hibridización de los orbitales de los elementos A y B , lo que produce una sola banda de estados. Conforme se incrementa

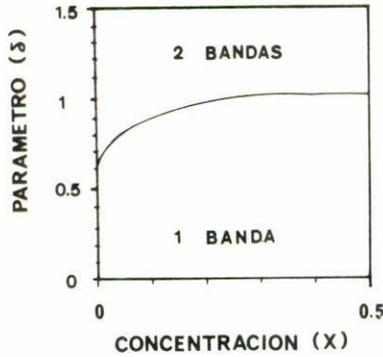


FIGURA 3. Régimenes de banda en el espacio (x, δ) . Para valores grandes de δ el espectro se parte en dos bandas.

el parámetro δ , el espectro se parte en dos bandas; para concentraciones pequeñas la especie A puede ser considerada como una impureza y lo que sucede entonces es que la banda de estados de impurezas se separa de la banda de estados del sustrato, formado por la especie B (Fig. 5). En la Fig. 2b se muestra la densidad de estados para valores de (x, δ) en los que la banda se empieza a partir. Al ir aumentando el valor de δ , la separación entre las bandas crece. En la Fig. 2, la densidad de estados en la aproximación del cristal virtual [10] se muestra con la línea a trazos. Esta se obtiene de la Ec. (15) como una aproximación a orden cero en δ , esto es, haciendo el reemplazo

$$\Sigma(z) \rightarrow \epsilon \tag{22}$$

en la Ec. (11).

Para $\delta \ll 1$ los resultados de CPA y VCA coinciden. La razón física de esto es que, siendo muy pequeña la diferencia entre los elementos A y B , a pesar del desorden, es una buena aproximación suponer un potencial periódico para el medio efectivo en el que los estados electrónicos aún pueden ser asignados a vectores de onda del cristal. Esta aproximación pierde, obviamente, todos los niveles de impureza. En VCA la Ec. (22) representa una simple aproximación de banda rígida, que corresponde a un corrimiento no distorsionado de la banda, como se puede apreciar en la Fig. 2.

De la discusión anterior vemos que de acuerdo con los valores de (x, δ) , puede suceder que el espectro aparezca ya sea como una o dos bandas de estados. En la Fig. 3 se muestra el plano (x, δ) en el que se ha trazado la línea que divide las zonas de régimen de una banda y de bandas separadas. Dependiendo del valor de δ para un par de elementos A y B dados puede suceder que el espectro de la aleación muestre cambios importantes o no como una función de la concentración, x . Por ejemplo, si fijamos $\delta = 0.5$ vemos en la Fig. 3 que para cualquier valor que tomemos de la concentración nunca saldremos del régimen de una sola banda. Esto se ve explícitamente en la Fig. 4a, en la que se muestra como una área sombreada la zona de energías permitidas. Para $\delta = 0.5$ el espectro en la Fig. 4a es siempre de

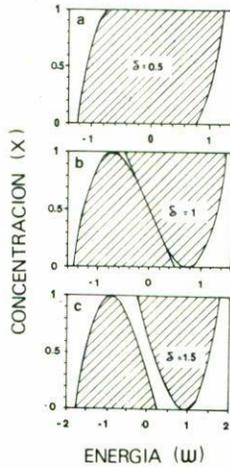


FIGURA 4. Espectro en función de la concentración x para valores del parámetro δ de (a) $\delta = 0.5$, (b) $\delta = 1.0$ y (c) $\delta = 1.5$.

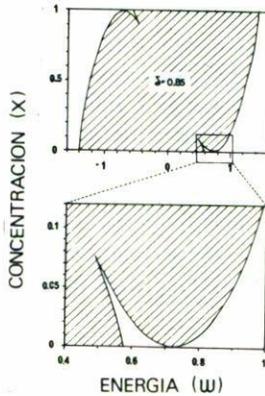


FIGURA 5. Espectro en función de x para $\delta = 0.85$.

una banda. Para $\delta \geq 1.0$ la aleación está siempre en régimen de bandas separadas, Figs. 4b y 4c, para cualquier valor de la composición. En el caso especial de $\delta = 1.0$ y $x = 0.5$ la aleación queda justo en el límite entre los dos regímenes: el espectro no está separado pero la densidad de estados tiene un punto cero. Un caso interesante lo constituye $\delta = 0.85$ en el que el espectro pasa de un régimen a otro dependiendo de la concentración x . En la Fig. 5 se ve que para concentraciones muy pequeñas de A el espectro consta de una banda muy ancha, que corresponde a los estados del sustrato, y de una banda muy angosta que corresponde a los estados de impureza. Al aumentar x la banda de impurezas se ensancha hasta que llega a fundirse con la banda del sustrato.

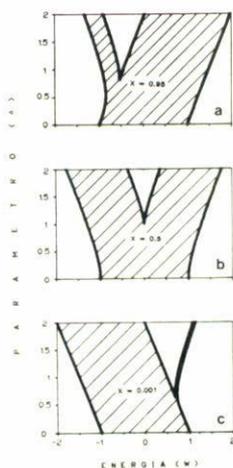


FIGURA 6. Espectro en función del parámetro δ para concentraciones de (a) $x = 0.95$, (b) $x = 0.5$ y (c) $x = 0.001$.

La Fig. 6 muestra el comportamiento del espectro en función de la diferencia δ entre elementos. Aun en el caso de concentraciones muy pequeñas, por ejemplo $x = 0.001$ en la Fig. 6b, para valores de δ suficientemente grandes se separa de la banda del sustrato una pequeña banda de estados de impureza.

En conclusión, se ha presentado de manera simple y detallada la aproximación del potencial coherente, CPA, e ilustrado su utilidad usando un modelo simple de aleación binaria. Consideramos que el trabajo es importante a nivel de enseñanza, debido a que en la mayoría de los cursos de estado sólido cuando mucho se menciona esta aproximación pero por lo general nunca es tratada a fondo y el estudiante nunca aprende a aplicarla.

Resultados similares son reportados en la Ref. [4], pero nuestra presentación es más didáctica y de mayor utilidad para quienes se inician en el tema.

Agradecimientos

Los resultados presentados en este trabajo fueron obtenidos como parte de un curso en el posgrado en física del IFUASLP, que ha recibido apoyo por parte de la Dirección Adjunta de Formación de Recursos Humanos (CONACYT) y la Dirección General de Investigación Científica y Superación Académica (SEP).

Referencias

1. J.M. Ziman, *Models of Disorder*. Cambridge U.P., Great Britain (1979).
2. G. Rickayzen, *Green Functions and Condensed Matter*. Academic Press, Great Britain (1980) pp.97-120.
3. K.G. Wilson, *Phys. Rev.* **B4** (1971) 3174; S. Ma, *Rev. Mod. Phys.* **45** (1973) 581; M.E. Fisher, *Rev. Mod. Phys.* **46** (1974) 597; K.G. Wilson and J. Kogut, *Phys. Rep.* **C12** (1974) 75; K.G. Wilson, *Rev. Mod. Phys.* **47** (1975) 773; J.M. Humphrey and L.P. Kadanoff, *Am. J. Phys.* **46** (1978) 652.
4. B. Velický, S. Kirkpatrick and H. Ehrenreich, *Phys. Rev.* **175** (1968) 747.
5. M. Lax, *Rev. Mod. Phys.* **23** (1951) 287.
6. J.F. Edwards, *Phil. Mag.* **6** (1961) 617; J.L. Beeby and S.F. Edwards, *Proc. Roy. Soc.* **A274** (1963) 395.
7. D.N. Taylor, *Phys. Rev.* **156** (1967) 1017.
8. P. Soven, *Phys. Rev.* **156** (1967) 809.
9. J. Mathews and R.L. Walker, *Mathematical Methods of Physics*. W.A. Benjamin Inc., USA (1970), pp.322-344.
10. L. Nordheim, *Ann. Physik*, **9** (1931) 607; R.J. Elliot, J.A. Krumhansl and P.L. Leath, *Rev. Mod. Phys.* **46** (1974) 465.
11. A. Bansil, L. Schwartz and H. Ehrenreich, *Phys. Rev.* **12B** (1975) 2893; A. Bansil, *Phys. Rev.* **20B** (1979) 4025 y 4035.
12. N.W. Ashcroft and N.D. Mermin, *Solid State Physics*. Holt, Rinehart and Winston, U.S.A. (1976) pp.175-189.
13. J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc.* **A276** (1963) 238.
14. G.E. Brown, *Many-Body Problems*. North-Holland P.C., Amsterdam (1972).
15. F.J. Dyson, *Phys. Rev.* **92** (1953) 1331.
16. E.N. Economou, *Green's Functions in Quantum Physics*, 2nd Edition. Springer-Verlag, Heidelberg (1983), pp.78-89.
17. Para el cálculo de una sola impureza, véase por ejemplo la Ref. [2], pp.292-295.

Abstract. The use of the coherent potential approximation (CPA) is illustrated for the case of a random binary alloy. The electronic structure is described in a tight binding scheme and the two atomic species are made different only in their orbital energies. Every solution to the CPA equations is discussed and typical densities of states are shown. The electronic spectrum is fully analysed in terms of the parameters of the alloy.